

Minja Volotinen

MONIULOTTEINEN SKAALAU SISÄTILAPAIKANNUKSESSA

Tekniikan ja luonnontieteiden tiedekunta
Diplomityö
Toukokuu 2019

TIIVISTELMÄ

MINJA VOLOTINEN: Moniulotteinen skaalaus sisätilapaikannuksessa

Tampereen yliopisto

Diplomityö, 60 sivua

Toukokuu 2019

Teknis-luonnontieteellinen koulutusohjelma

Pääaine: Matematiikka

Tarkastajat: Yliopistonlehtori Simo Ali-Löytty, Professori Robert Piché,

Tekniikan tohtori Matti Raitoharju

Avainsanat: WLAN, sisätilapaikannus, moniulotteinen skaalaus, bayesilainen päättely, signaalin vaimenemismalli

Tässä diplomityössä tutkitaan langatonta lähiverkkoa (WLAN, Wireless Local Area Network) hyödyntävää sisätilapaikannusta bayesilaisen päättelyn ja moniulotteisen skaalauksen avulla. RSS-skannaus on joukko WLAN-signaalinvoimakkuusmittauksia, joille kullekin on identifioitu yksikäsitteinen signaalin lähde eli MAC-osoite. Tässä työssä RSS-skannauksille pyritään etsimään moniulotteisen skaalauksen avulla sellainen koordinaattiesitys, joka vastaisi mahdollisimman hyvin mittapisteiden todellisia sijainteja. Skannausten välisiä etäisyyksiä arvioidaan hyödyntämällä bayesilaista päättelyä. Analyysimenetelmiä testataan simulaatiokokeilla.

Moniulotteisen skaalauksen avulla alkioille voidaan ratkaista optimaaliset koordinaatit, kun niiden väliset erilaisuudet tunnetaan. Työssä esitellään koordinaattimuunnosalgoritmi, jota käyttämällä koordinaattien väliset suhteelliset etäisyydet eivät muutu. Bayesilaisessa päättelyssä posterioritodennäköisyyteen vaikuttaa havaintoaineiston informaatio sekä subjektiivinen ennakkotieto tapahtumasta. Tässä työssä bayesilaisen päättelyn hyödyntämä aineisto muodostetaan simuloimalla signaalinvoimakkuusmittauksia virtuaaliseen huoneeseen signaalin vaimenemismallin mukaisesti. Aineistosta muodostetaan todennäköisyystiheysfunktioita ydinestimoinnin avulla.

Kun yksittäiset RSS-skannaukset kattavat riittävän monta signaalinvoimakkuusmittausta tukiasemista, jotka ovat sijoittuneet vaihtelevasti eri puolelle huonetta ja sen lähiympäristöä, löydetään bayesilaista päättelyä hyödyntävällä analyysimenetelmällä useimmissa tapauksissa RSS-skannauksille koordinaatit, jotka kuvaavat mittapisteiden todellisia sijainteja. Tapauksissa, joissa signaalinvoimakkuusmittauksia saadaan vain muutamasta tukiasemasta, ei bayesilaisen etäisyydestimoinnin ja moniulotteisen skaalauksen yhdistelmistä ole hyötyä ongelman ratkaisemiseksi.

ABSTRACT

MINJA VOLOTINEN: Multidimensional scaling in indoor positioning

Tampere University

Master's Thesis, 60 pages

May 2019

Master's Degree Programme in Engineering and Natural Sciences

Major: Mathematics

Examiner: University Lecturer Simo Ali-Löytty, Professor Robert Piché,

Postdoctoral Researcher Matti Raitoharju

Keywords: WLAN, indoor positioning, multidimensional scaling, Bayesian inference, path-loss model

The aim of this work is to explore utilization of wireless local area network (WLAN) in indoor positioning with the help of Bayesian inference and multidimensional scaling. RSS-scan is a set of WLAN-signal strength measurements. For each measurement a unique source, i.e. MAC-address is identified. In this thesis RSS-scans are attempted to be placed in order by their position using multidimensional scaling. Distances between the scans are estimated using Bayesian inference. Analysis methods are experimented by simulation tests.

The optimal coordinates for elements can be calculated with the help of multidimensional scaling when the disparities between the elements are known. A coordinate transform algorithm, which rotates, scales, reflects and transforms coordinates without their relative distances changing, is introduced. Bayesian inference is a method where posterior probabilities are constructed using both prior probability and observed data. In this thesis the data is formed by simulating RSS-scans in virtual room using path-loss model. Probability density functions are formed from the data using kernel density estimation.

When RSS-scans cover enough signal strength measurements from access points that are located in different parts of the room and its surroundings, the RSS-scans can be placed in their correct locations relative to one another using Bayesian inference and multidimensional scaling as an analysis method. On the other hand, when the RSS-measurements are obtained from only a few MAC-addresses, there is not much benefit in using Bayesian inference and multidimensional scaling analysis as a combination.

ALKUSANAT

Tämän diplomityön tekeminen alkoi keväällä 2018 työskennellessäni tutkimusapulaisena Tampereen teknillisen yliopiston matematiikan laboratoriollla. Tuolloin diplomityölle muotoutui aihe, mutta itse kirjoitustyö tehtiin pääosin vasta kevään 2019 aikana.

Haluan kiittää yliopistonlehtori Simo Ali-Löyttyä loistavasta ohjaamistyöstä, ymmärryksestä ja sopivasta määrästä huumoria ohjauskeskustelujemme yhteydessä. Lisäksi haluan esittää suuret kiitokset professori Robert Pichéille ja tekniikan tohtori Matti Raitoharjulle arvokkaista neuvoista työn loppuvaiheessa.

Lopuksi haluan kiittää perhettäni kannustuksesta ja uskosta kykyihini. Erityismaininta siskolleni Iinalle, joka urhoollisesti luki työn kannesta kanteen ja antoi siitä lempeästi palautetta. Kiitos myös kaikille ystäväilleni, jotka ovat kulkeneet mukana läpi opiskeluvuosien. Erityiskiitokset ovat paikallaan Hiukkasen tädeille, joihin tutustuin ensimmäisinä fuksiviikkoina syksyllä 2012 (ollessamme vielä Hiukkasen fuksityttöjä) ja joita ilman olisin tuskin selviytynyt opinnoissani edes ensimmäiseen Wappuun asti.

Tampereella, 9.5.2019

Minja Volotinen

SISÄLLYS

1. Johdanto	1
2. Teoria	3
2.1 Moniulotteinen skaalaus	3
2.1.1 Moniulotteisen skaalauksen määritelmiä	4
2.1.2 Klassinen moniulotteinen skaalaus	7
2.1.3 Iteratiiviset moniulotteisen skaalauksen algoritmit	13
2.1.4 Moniulotteinen skaalaus SMACOF-menetelmällä	13
2.2 Koordinaattien muunnosoperaatiot	19
2.2.1 Skaalaus, peilaus, rotaatio ja siirtäminen	20
2.2.2 Prokrustes-analyysi	24
2.2.3 Moniulotteisen skaalauksen tuloskoordinaattien muuntaminen	26
2.3 Bayesilainen päättely	28
2.4 Ydinestimointi	31
3. Sovellus	34
3.1 Sisätilapaikannus	35
3.2 MDS-algoritmien käyttö WLAN-sisätilapaikannuksessa	37
3.3 Signaalin vaimenemismalli	39
3.4 RSS-skannausten samanlaisuuden arviointi	41
4. Testaus	43
4.1 Mittausaineiston kerääminen ja analysointi	44
4.2 Simulaatioaineiston muodostaminen	45
4.3 Simulaation analysointi	46
4.4 Tulokset	50
5. Yhteenveto	55
Lähteet	57

LYHENTEET

AP	langattoman lähiverkon tukiasema (Access Point, Wireless Access Point)
dWMDS	hajautettu painotettu moniulotteinen skaalaus (distributed Weighted MultiDimensional Scaling)
DWMDS	dynaaminen painotettu moniulotteinen skaalaus (Dynamic Weighted MultiDimensional Scaling)
FP	signaalinvoimakkuusskannaus (FingerPrint)
GNSS	maailmanlaajuinen satelliittijärjestelmä (Global Navigation Satellite System)
MAC	MAC-osoite, verkkosovittimen ethernet-verkossa yksilövä laite (Media Access Control)
MATLAB	MATrix LABoratory, tietokoneohjelmisto
MDS	moniulotteinen skaalaus (MultiDimensional Scaling)
RSS	vastaanotetun radiosignaalin voimakkuus (Received Signal Strength)
SMACOF	eräs iteratiivisen moniulotteisen skaalauksen menetelmä (Scaling by MAjorizing COmplicated Function)
TDOA	signaalin saapumisaikaeroon perustuva paikannusteknologia (Time Difference Of Arrival)
TOA	signaalin saapumisaikamittauksiin perustuva paikannusteknologia (Time Of Arrival)
UWB	paikannusteknologia (Ultra-WideBand)
WLAN	langaton lähiverkko (Wireless Local Area Network)
WMDS	painotettu moniulotteinen skaalaus (Weighted MultiDimensional Scaling)

MERKINNÄT

a	skalaari a
\mathbf{a}	vektori \mathbf{a}
\mathbf{A}	matriisi \mathbf{A}
$a_{i,j}$	matriisin \mathbf{A} rivin i ja sarakkeen j alkio
$\begin{bmatrix} a_{i,j} \end{bmatrix}$	alkioista $a_{i,j}$ koostuva matriisi
\mathbf{A}^{-1}	matriisin \mathbf{A} käänteismatriisi
\mathbf{A}^+	matriisin \mathbf{A} Moore-Penrose-inverssi
$A^{[i]}$	muuttujan A tila iteraation i aikana
$\bar{\mathbf{a}}$	koordinaattipisteiden \mathbf{A} aritmeettinen keskiarvo
$(\cdot)^\top$	transpoosi
\propto	on verrannollinen
$a \in A$	alkio a kuuluu joukkoon A
$\ \mathbf{a}\ $	vektorin \mathbf{a} euklidinen normi
$\ \mathbf{A}\ $	matriisin \mathbf{A} alkioittainen normi
$\frac{\partial f}{\partial x}$	funktion f osittaisderivaatta muuttujan x suhteen
$D_x f(x)$	funktion f derivaatta muuttujan x suhteen
$\sum_{i < j} a_{i,j}$	niiden alkioiden $a_{i,j}$ summa, joille pätee ehto $i < j$
\emptyset	tyhjä joukko
$\mathbf{1}_{n \times n}$	ykkösmatriisi, jonka koko on $n \times n$
$\mathbf{1}_n$	ykkösvektori, jonka koko on $n \times 1$
$\operatorname{argmax}_x f(x)$	arvo x joka maksimoi funktion $f(x)$
$a \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$	satunnaismuuttuja a on normaali-jakautunut odotusarvolla μ ja varianssilla σ^2
A	kappaleessa 3.3 signaalin vaimenemismallin parametri
$B(x \alpha, \beta)$	Beta-jakauma
\mathbf{C}	keskitysmatriisi
$C(x_i, x)$	niihen alkioiden x_i lukumäärä, jotka ovat samassa luokassa muuttujan x kanssa
$\delta_{i,j}$	alkioiden i ja j välinen erilaisuus
Δ	erilaisuusmatriisi
$d_{i,j}$	alkioiden i ja j välinen euklidinen etäisyys
$d_{i,j}^*$	alkioiden i ja j välisen etäisyyden paras estimaatti
$d_{i,j}(\mathbf{Z})$	koordinaattimatriisin \mathbf{Z} koordinaattipisteiden \mathbf{z}_i ja \mathbf{z}_j välinen euklidinen etäisyys
\mathbf{D}	euklidinen etäisyysmatriisi moniulotteisen skaalauksen tuloskoordinaateista \mathbf{Y}

$\mathbf{D}^{(2)}$	alkioittain neliöity etäisyysmatriisi
$\mathbf{D}(\mathbf{Z})$	koordinaateista \mathbf{Z} laskettu euklidinen etäisyysmatriisi
ε	suurin sallittu virhe
$e_{i,j}^2$	pisteiden i ja j välisen erilaisuuden ja etäisyyden välinen virhe
\mathbf{e}_i	luonnollinen kantavektori
$\hat{f}(x)$	ydinestimaatti yksiulotteiselle aineistolle
$\hat{f}(\mathbf{x})$	ydinestimaatti moniulotteiselle aineistolle
$\Gamma(a)$	gammafunktio
h	ydinestimaattorin tasoitusparametri
\mathbf{I}_n	identiteettimatriisi, jonka koko on $n \times n$
k	kuultujen MAC-osoitteiden lukumäärä
$K(u)$	kernel- eli ydinfunktio
λ	ominaisarvo
$\mathbf{\Lambda}$	ominaisarvoista muodostettu diagonaalimatriisi
l	kappaleessa 2.1 valittu moniulotteisen skaalauksen tuloskoordinaattien dimensio, kappaleessa 2.4 histogrammin luokan leveys
\ln	luonnollinen logaritmi
\log_{10}	10-kantainen logaritmi
n	yleisesti aineiston alkioden lukumäärä, jonka lisäksi kappaleessa 3.3 signaalin vaimenemismallin parametri
m	hypoteettisten koordinaattien dimensio
M	iteraatioiden lukumäärä
$p(\cdot)$	todennäköisyystiheysfunktio
$P(A)$	tapahtuman A todennäköisyys
$P(A B)$	tapahtuman A todennäköisyys ehdolla B
\mathbf{P}	peilausmatriisi
$\mathbf{P}_{xy}, \mathbf{P}_{xz}, \mathbf{P}_{yz}$	tasokohtaiset peilausmatriisit
\mathbf{R}	yleinen rotaatiomatriisi
$\mathbf{R}_z(\alpha)$	rotaatiomatriisi z -akselin suhteen kulmassa α
$\mathbf{R}_y(\beta)$	rotaatiomatriisi y -akselin suhteen kulmassa β
$\mathbf{R}_x(\gamma)$	rotaatiomatriisi x -akselin suhteen kulmassa γ
σ	kokonaisvirhe
$\sigma_r(\mathbf{Y})$	raaka stressi
Σ^2	minimoitava funktio
s	skaalausvakio skaalauksen ollessa vakio
s_x, s_y, s_z	akselikohtaiset skaalausvakiot
\mathbf{S}	skaalausmatriisi
$\tau(\mathbf{Y}, \mathbf{Z})$	stressin majorisointifunktio
\mathbf{t}	translaatiovektori

\mathbf{T}	translaatiomatriisi
$\text{tr } \mathbf{A}$	matriisin \mathbf{A} jälki
u_i	pisteessä i mitattu signaalinvoimakkuus
Δu	kahden signaalinvoimakkuusmittauksen välinen erotus
\mathbf{u}_l	vektori, joka koostuu MAC-osoitteeseen l identifioiduista signaalinvoimakkuuksista u_i ja u_j
$\Delta \mathbf{u}$	vektori, joka koostuu kahdessa pisteessä mitattujen signaalinvoimakkuusmittausten välisistä erotuksista
$\mathbf{U}_{i,j}$	matriisi, johon on koottu kaikki yhteisiin MAC-osoitteisiin identifioidut signaalinvoimakkuusmittaukset mittapisteistä i ja j
\mathbf{v}	ominaisvektori
\mathbf{V}	ominaisvektoreista muodostettu matriisi
w	kappaleessa 3.3 virhe
$w_{i,j}$	erilaisuutta $\delta_{i,j}$ vastaava paino
\mathbf{W}	painomatriisi
\mathbf{x}	(hypoteettinen) koordinaattipiste
$\Delta \mathbf{x}$	vektorien \mathbf{x}_i ja \mathbf{x}_j välinen erotus
\mathbf{X}	hypoteettinen koordinaattimatriisi
$\tilde{\mathbf{X}}$	keskitetty hypoteettinen koordinaattimatriisi
\mathbf{Y}	moniulotteisen skaalauksen tuloskoordinaattimatriisi
$\tilde{\mathbf{Y}}$	keskitetty tuloskoordinaattimatriisi

1. JOHDANTO

Paikannus on tutkimusala, jolle on yhä enemmän tarvetta yhteiskunnan muuttuessa. Ulkotiloissa paikannus tapahtuu pitkälti maailmanlaajuisen paikallistamisjärjestelmien (GNSS, Global Navigation Satellite System) avulla. Satelliittien lähettämät paikannussignaalit eivät kuitenkaan läpäise rakennuksien seiniä ja kattoja, joten sisätiloissa on tarpeen käyttää muita ratkaisuja. Sisätilapaikannuksen metodeja ja teknologioita on tarkasteltu lähteessä [13].

Langattoman lähiverkon (WLAN, Wireless Local Area Network) tukiasemia on lähes kaikissa julkisissa ja yksityisissä sisätiloissa. Langatonta lähiverkkoa ei ole suunniteltu käytettäväksi paikannuksessa, mutta sitä voidaan hyödyntää paikannustarkoituksiin esimerkiksi mittaamalla WLAN-tukiasemien lähettämien signaalien voimakkuuksia. Signaalinvoimakkuusskannaukseksi tai radiosormenjäljeksi kutsutaan joukkoa signaalinvoimakkuusmittauksia (RSS, Received Signal Strength) yksikäsitteisistä signaalin lähteistä eli MAC-osoitteista. Perinteisesti WLAN-sisätilapaikannuksessa käytetään fingerprinting-menetelmää, jossa sijainti pyritään estimoimaan vertaamalla mitattuja radiosormenjälkiä (fingerprint) tietokantaan, johon on koottu tunnetuissa sijainneissa mitattuja vastaavia skannauksia [22].

Toisin kuin esimerkiksi edellä mainitussa fingerprinting-menetelmässä, tässä työssä käytettävillä metodeilla ei ole tarkoitus toteuttaa reaaliaikaista mobiilipaikannusta. Sen sijaan tulosten avulla on tarkoitus tutkia, mitä muuta informaatiota WLAN-skannauksista voidaan päätellä. Pitkän tähtäimen tavoitteena on selvittää, pystyykö pelkän WLAN-tiedon avulla selvittämään esimerkiksi missä rakennuksen ovet tai hissit sijaitsevat ja voidaanko eri kerroksista tuleva signaalinvoimakkuustieto eriyttää toisistaan. Sisätilapaikannuksen kehittämisen kannalta kiinnostavaa on myös tutkia, miten signaalinvoimakkuusmittauksiin soveltuvan etäisyysmetriikan avulla voitaisiin tunnistaa signaalinvoimakkuusskannauksiin liittyvien sijaintien väliset suhteet kolmiulotteisessa reaali maailmassa. Tässä tutkimuksessa ratkaistavana on siis yleisempi paikantamisongelma: *Jos annetaan joukko WLAN-signaalinvoimakkuusskannauksia eikä mitään muuta informaatiota, voidaanko niille löytää koordinaattiesitys, joka vastaa skannauksiin liittyviä sijainteja reaali maailmassa?*

Tässä työssä paikannusongelmaa tarkastellaan olettaen, että skannaukset on etukäteen jaettu sijaintinsa mukaan kohtuullisen pieniin klustereihin. Skannaukset järjestetään klusterien sisällä moniulotteisen skaalauksen keinoin kolmiulotteiseen maailmaan sijainnin mukaan. Moniulotteisen skaalauksen suorittamiseksi signaalinvoimakkuusskannausten erilaisuus on arvioitava. Tässä tutkimuksessa arviointiin ehdotetaan bayesilaista päättelyä hyödyntävää etäisyysmetriikkaa. Etäisyydenestimointimenetelmällä pyritään päättämään aineiston sisäisiin rakenteisiin nojautuva samanlaisuusmitta aineistosta, joka on muodostettu simuloimalla signaalinvoimakkuusmittauksia reaaliympäristössä tehtyjen mittausten pohjalta.

Tässä diplomityössä esitellään matemaattinen tausta moniulotteisen skaalauksen menetelmille, joiden avulla mittapisteille voidaan ratkaista optimaaliset koordinaatit niiden välisten erilaisuusmittojen perusteella. Saadut koordinaatit muunnetaan skaalauksen, rotaation, peilauksen ja siirtämisen avulla niin, että niitä voidaan verrata referenssikoordinaatteihin. Lisäksi työssä pureudutaan bayesilaiseen päättelyyn, jonka avulla mittapisteiden välinen erilaisuus ja siten etäisyys pyritään arvioimaan pelkkien WLAN-signaalinvoimakkuusskannausten perusteella. Lopuksi menetelmää testataan simuloidulla aineistolla, johon työssä kuvattuja matemaattisia malleja sovelletaan.

2. TEORIA

Tässä luvussa esitellään työn kannalta oleelliset matemaattiset menetelmät. Menetelmiä hyödynnetään etäisyyden ja siten sijaintien estimointiin luvussa [3](#) sekä simulaatiosta saatujen tulosten analysointiin luvussa [4](#).

Moniulotteisen skaalauksen avulla voidaan visualisoida aineiston alkioden välisiä rakenteita. Alkioden keskinäisille erilaisuuksille annetaan numeerinen arvo, joiden perusteella niille arvioidaan parhaat mahdolliset koordinaatit. Moniulotteisesta skaalauksesta esitellään klassinen versio sekä eräs iteratiivinen painotettu moniulotteisen skaalauksen menetelmä.

Moniulotteisen skaalauksen tuloskoordinaatit ovat mielivaltaisessa rotaatiossa. Jos ne halutaan siirtää vastaamaan jotain koordinaattijärjestelmää, tulee niitä skaalata, kiertää, siirtää ja mahdollisesti peilata. Koordinaattien muunnosoperaatioihin esitellään matemaattiset työkalut kappaleessa [2.2](#).

Bayesilainen päättely on tilastotieteen ja todennäköisyyslaskennan menetelmä, jossa tapahtuman posterioritodennäköisyyden laskemisessa otetaan huomioon sekä tilasto että subjektiivinen ennakkotieto tapahtuman todennäköisyydestä. Ydinestimoinnin avulla puolestaan voidaan muodostaa todennäköisyysjakauma tilastoidun aineiston perusteella. Matemaattiset lähtökohdat bayesilaiselle päättelylle sekä ydinestimoinnille esitellään kappaleissa [2.3](#) ja [2.4](#).

2.1 Moniulotteinen skaalaus

Moniulotteisen skaalauksen tavoite on löytää matalan dimension koordinaattiesitys joukolle alkioita niin, että näiden alkioden etäisyydet mataladimensioisessa esityksessä vastaavat mahdollisimman hyvin niiden välistä erilaisuutta. [4](#), [28](#)

Jos aineiston alkioden koordinaatit tiedetään, on yksinkertaista laskea koordinaattien väliset etäisyydet. Jos taas pelkästään etäisyydet tiedetään, on geometriaa apuna käyttäen mahdollista selvittää pisteiden suhteelliset koordinaatit [32](#). Jos tieto etäisyyksistä kuitenkin sisältää virheitä, ei optimaalisten koordinaattien etsiminen

pelkästään geometriaa apuna käyttäen ole enää kovin yksinkertaista. Moniulotteinen skaalaus (MDS, MultiDimensional Scaling) on matemaattinen malli, jonka avulla tällaiset optimaaliset koordinaatit on mahdollista laskea tehokkaasti.

Moniulotteinen skaalaus on kuitenkin tätäkin monipuolisempi työkalu. Mallia käytetään laajalti erilaisissa sovelluksissa visualisoimaan aineiston piilotettuja rakenteita [7, 39]. Moniulotteisessa skaalauksessa alkioden samanlaisuudesta muodostetaan numeroarvo, joka kertoo kuinka samanlaiset tai erilaiset eri alkiot ovat toisiinsa verrattuna. Moniulotteisen skaalauksen avulla alkiot voidaan ikään kuin piirtää kartalle, jolloin kartan mittasuhteet heijastelevat aineiston sisäistä rakennetta. Siten esimerkiksi mielipide-eroja voidaan käyttää erilaisuuden mittana ja vaikkapa makuelämyksien, värien tai poliittisten puolueiden suhteille toisiinsa voidaan löytää visuaalinen esitys [7, 28].

Matemaattisesti on mahdollista suorittaa moniulotteinen skaalaus suurempiin, kuin perinteisiin kaksi- tai kolmidimensioisiin avaruuksiin. Yli kolmiulotteisia tuloksia on kuitenkin mahdotonta esittää visuaalisesti perinteisin keinoin, mutta muita, joskin epätäydellisiä, visualisointeja on silti mahdollista muodostaa. Matemaattinen käsittely on samanlaista tuloksen dimensiosta riippumatta. [28]

Tässä kappaleessa määritellään aluksi kaikille MDS-algoritmeille yhteisiä käsitteitä, jonka jälkeen tutustutaan klassisen moniulotteisen skaalauksen yksityiskohtiin. Klassinen moniulotteinen skaalaus sopii hyvin tilanteisiin, joissa arvioidut alkioden väliset erilaisuudet vastaavat niiden välisiä euklidisia etäisyyksiä [10, 11] ja lisäksi kaikkien alkioden väliset etäisyydet tunnetaan [9]. Aina näin ei kuitenkaan ole, jolloin iteratiiviset moniulotteisen skaalauksen metodit osoittautuvat tarpeelliseksi. Viimeisenä esitellään eräs tällainen iteratiivinen menetelmä, jonka avulla voidaan esimerkiksi parantaa häiriöisillä erilaisuusestimaateilla suoritettavaa moniulotteista skaalausta painottamalla sellaisia erilaisuuksia, joiden uskotaan pitävän parhaiten paikkansa.

2.1.1 Moniulotteisen skaalauksen määritelmiä

Olkoon aineisto, jolle moniulotteinen skaalaus suoritetaan, äärellinen joukko, jossa on n alkioita. Merkitään aineiston alkioita ensisijaisesti indeksillä $i \in \{1, 2, \dots, n\}$ ja toissijaisesti indeksillä $j \in \{1, 2, \dots, n\}$. Merkitään lisäksi aineiston alkioden i ja j välisiä erilaisuuksia merkinnällä $\delta_{i,j}$. Seuraavaksi esitellään moniulotteiseen skaalaukseen liittyviä määritelmiä.

Määritelmä 2.1. *Aineiston hypoteettiset koordinaatit.* Alkion i hypoteettinen koordinaattiesitys m -dimensioisessa avaruudessa \mathbb{R}^m on m -ulotteinen pystyvektori \mathbf{x}_i .

Kaikki aineiston hypoteettiset koordinaattipisteet järjestetään $n \times m$ kokoiseen *hypoteettiseen koordinaattimatriisiin* \mathbf{X} :

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1^\top \\ \vdots \\ \mathbf{x}_i^\top \\ \vdots \\ \mathbf{x}_n^\top \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_{1,1} & \cdots & x_{1,j} & \cdots & x_{1,m} \\ & & \vdots & & \\ x_{i,1} & \cdots & x_{i,j} & \cdots & x_{i,m} \\ & & \vdots & & \\ x_{n,1} & \cdots & x_{n,j} & \cdots & x_{n,m} \end{bmatrix}.$$

Määritelmä 2.2. *Erilaisuusmatriisi* Δ on $n \times n$ kokoinen matriisi, johon järjestetään kaikki aineiston alkioden väliset erilaisuudet $\delta_{i,j}$ seuraavasti:

$$\Delta = [\delta_{i,j}] = \begin{bmatrix} \delta_{1,1} & \delta_{1,2} & \cdots & \delta_{1,n} \\ \delta_{2,1} & \delta_{2,2} & \cdots & \delta_{2,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \delta_{n,1} & \delta_{n,2} & \cdots & \delta_{n,n} \end{bmatrix},$$

missä erilaisuudet $\delta_{i,j}$ ovat ei-negatiivisia reaalinumeroita.

Erilaisuusmatriisi Δ kuvaa hypoteettisen koordinaattiesityksen \mathbf{X} pisteiden välisiä erilaisuuksia niin, että mitä suurempi erilaisuuden arvo, sitä erilaisempia pisteet ovat. Jos hypoteettiset koordinaatit \mathbf{x}_i ja \mathbf{x}_j ovat identtisiä, on niiden välinen erilaisuus nolla. Lisäksi oletetaan, että erilaisuudet ovat vaihdannaisia ja että piste on itsensä kanssa täysin samanlainen. Siten kaikilla indeksien i ja j arvoilla pätee

$$\begin{cases} \delta_{i,j} = \delta_{j,i} \\ \delta_{i,i} = 0. \end{cases}$$

Klassisen moniulotteisen skaalauksen tapauksessa oletetaan, että kaikkien pisteiden väliset erilaisuudet $\delta_{i,j}$ tunnetaan. Epäklassisissa tapauksissa tämä ehto ei ole välttämätön.

Määritelmä 2.3. *Moniulotteisen skaalauksen tulokoordinaatit.* Moniulotteisen skaalauksen *tulokoordinaattimatriisi* on $n \times m$ kokoinen matriisi \mathbf{Y} , joka sisältää aineiston alkioden konkreettiset koordinaatit $\mathbf{y}_i \in \mathbb{R}^m$ vastaavassa muodossa kuin hypoteettinen koordinaattimatriisi \mathbf{X} .

Määritelmä 2.4. Tulokoordinaattien \mathbf{Y} väliset etäisyydet $d_{i,j}$ ovat *euklidisia etäisyyksiä*.

syyksiä eli niille pätee

$$d_{i,j} = \sqrt{\sum_{k=1}^m (y_{i,k} - y_{j,k})^2} = \|\mathbf{y}_i - \mathbf{y}_j\|.$$

Etäisyysmatriisi \mathbf{D} on $n \times n$ kokoinen matriisi, johon on järjestetty koordinaattimatriisin \mathbf{Y} pisteiden väliset etäisyydet $d_{i,j}$:

$$\mathbf{D} = [d_{i,j}] = \begin{bmatrix} d_{1,1} & d_{1,2} & \cdots & d_{1,n} \\ d_{2,1} & d_{2,2} & \cdots & d_{2,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ d_{n,1} & d_{n,2} & \cdots & d_{n,n} \end{bmatrix}.$$

Moniulotteisessa skaalauksessa tavoitteena on löytää tuloskoordinaattimatriisi \mathbf{Y} , jonka pisteiden väliset euklidiset etäisyydet $d_{i,j}$ vastaavat mahdollisimman hyvin aineiston erilaisuuksia $\delta_{i,j}$.

Määritellään vielä yleinen esitys koordinaattimatriisien pisteiden välisille euklidisille etäisyyksille.

Määritelmä 2.5. Minkä tahansa $n \times m$ -kokoisen koordinaattimatriisin \mathbf{Z} kahden koordinaattipisteen \mathbf{z}_i ja \mathbf{z}_j välistä euklidista etäisyyttä $\|\mathbf{z}_i - \mathbf{z}_j\|$ voidaan merkitä $d_{i,j}(\mathbf{Z})$. Vastaavasti kuten määritelmässä [2.4](#) voidaan etäisyyksistä $d_{i,j}(\mathbf{Z})$ muodostaa etäisyysmatriisi, jota merkitään $\mathbf{D}(\mathbf{Z})$.

Pelkän etäisyysmerkinnän $d_{i,j}$ käyttäminen viittaa aina tässä teoksessa moniulotteisen koordinaattimatriisin tuloskoordinaatteihin \mathbf{Y} . Merkinnät $\mathbf{D}(\mathbf{Y})$ ja \mathbf{D} sekä $d_{i,j}$ ja $d_{i,j}(\mathbf{Y})$ ovat siten yhtäpitävät.

Määritellään lopuksi muutama hyödyllinen merkintä matriisin jäljelle ja sen alkioittaiselle normille.

Määritelmä 2.6. [\[17\]](#) s. 49] Matriisin $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ jälki ("trace") on

$$\text{tr} \mathbf{A} = \sum_{i=1}^n a_{i,i}.$$

Matriisin jälki on kätevä apuväline, kun erilaisia matriisien alkioiden summia halutaan esittää kompaktissa muodossa. Esimerkiksi seuraava matriisin jäljen ominai-

suus on jatkossa hyödyllinen:

$$\sum_{i=1}^n \mathbf{y}_i^\top \mathbf{x}_i = \text{tr} \sum_{i=1}^n \mathbf{y}_i \mathbf{x}_i^\top = \text{tr} \mathbf{Y}^\top \mathbf{X}.$$

Määritelmä 2.7. [17] s. 131] Matriisin $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times m}$ *alkioittainen normi* on

$$\|\mathbf{A}\| = \sqrt{\sum_{i=1}^n \|\mathbf{a}_i\|^2} = \sqrt{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m a_{i,j}^2},$$

missä vektori $\mathbf{a}_i^\top \in \mathbb{R}^m$ on matriisin \mathbf{A} rivin i vektori.

Matriisin alkioittaista normia kutsutaan myös Frobenius normiksi. Sille pätee seuraava tulos [17] s. 132]:

$$\|\mathbf{A}\|^2 = \text{tr}(\mathbf{A}^\top \mathbf{A}) = \text{tr}(\mathbf{A} \mathbf{A}^\top).$$

2.1.2 Klassinen moniulotteinen skaalaus

Moniulotteinen skaalaus pyrkii löytämään sellaisen koordinaattiesityksen \mathbf{Y} , joka minimoi etäisyyksien $d_{i,j}(\mathbf{Y})$ ja erilaisuuksien $\delta_{i,j}$ välisen virheen. Minimointiongelmalle on löydettävissä analyyttinen ratkaisu, joka esitellään seuraavaksi. [4] s. 261–263]

Etäisyysmatriisi \mathbf{D} koostuu koordinaattipisteiden \mathbf{y}_i välisistä euklidisista etäisyyksistä $d_{i,j}$. Etäisyysmatriisi \mathbf{D} voidaan siksi esittää koordinaattimatriisin \mathbf{Y} avulla [4] s. 262]. Näin ollen pisteiden i ja j välinen euklidisen etäisyyden neliö voidaan esittää muodossa

$$(\mathbf{y}_i - \mathbf{y}_j)^\top (\mathbf{y}_i - \mathbf{y}_j) = \|\mathbf{y}_i\|^2 - 2\mathbf{y}_i^\top \mathbf{y}_j + \|\mathbf{y}_j\|^2.$$

Lause 2.1.1. [4] s. 262] *Alkioittain neliöity etäisyysmatriisi $\mathbf{D}^{(2)}$ voidaan muodostaa matriisiesityksenä*

$$\mathbf{D}^{(2)} = \mathbf{Z} - 2\mathbf{Y}\mathbf{Y}^\top + \mathbf{Z}^\top, \quad (2.1)$$

missä matriisi \mathbf{Z} on muotoa

$$\mathbf{Z} = \begin{bmatrix} \|\mathbf{y}_1\|^2 \\ \|\mathbf{y}_2\|^2 \\ \vdots \\ \|\mathbf{y}_n\|^2 \end{bmatrix} \mathbf{1}_n^\top = [\|\mathbf{y}_i\|^2] \mathbf{1}_n^\top$$

Todistus. Merkitään matriisin $\mathbf{Z} - 2\mathbf{Y}\mathbf{Y}^\top + \mathbf{Z}^\top$ rivin i ja sarakkeen j alkioita merkinnällä $a_{i,j}$. Tällöin

$$a_{i,j} = \mathbf{e}_i^\top (\mathbf{Z} - 2\mathbf{Y}\mathbf{Y}^\top + \mathbf{Z}^\top) \mathbf{e}_j, \quad (2.2)$$

missä vektori \mathbf{e}_i on luonnollinen kantavektori. Käyttäen matriisien osittelulakia, saadaan yhtälö (2.2) muotoon

$$a_{i,j} = \mathbf{e}_i^\top \mathbf{Z} \mathbf{e}_j - 2\mathbf{e}_i^\top \mathbf{Y} \mathbf{Y}^\top \mathbf{e}_j + \mathbf{e}_i^\top \mathbf{Z}^\top \mathbf{e}_j.$$

Matriisin \mathbf{Z} määritelmän nojalla termi $\mathbf{e}_i^\top \mathbf{Z} \mathbf{e}_j$ sievenee muotoon $\|\mathbf{y}_i\|^2$ ja termi $\mathbf{e}_i^\top \mathbf{Z}^\top \mathbf{e}_j$ muotoon $\|\mathbf{y}_j\|^2$. Termiin $2\mathbf{e}_i^\top \mathbf{Y} \mathbf{Y}^\top \mathbf{e}_j$ voidaan hyödyntää matriisien liitännäisyyslakia, jolloin

$$2\mathbf{e}_i^\top \mathbf{Y} \mathbf{Y}^\top \mathbf{e}_j = 2(\mathbf{e}_i^\top \mathbf{Y})(\mathbf{Y}^\top \mathbf{e}_j) = 2\mathbf{y}_i^\top \mathbf{y}_j.$$

Täten on osoitettu, että matriisin $\mathbf{Z} - 2\mathbf{Y}\mathbf{Y}^\top + \mathbf{Z}^\top$ rivin i ja sarakkeen j alkio on

$$a_{i,j} = \|\mathbf{y}_i\|^2 - 2\mathbf{y}_i^\top \mathbf{y}_j + \|\mathbf{y}_j\|^2 = \delta_{i,j}^2.$$

□

Klassinen moniulotteinen skaalaus käyttää hyväkseen matriisin tuplakeskitystä. Määritellään sitä varten keskitysmatriisi \mathbf{C} .

Määritelmä 2.8. [4 s. 262] *Keskitysmatriisi* \mathbf{C} on $n \times n$ kokoinen matriisi

$$\mathbf{C} = \mathbf{I}_n - \frac{1}{n} \mathbf{1}_{n \times n}, \quad (2.3)$$

missä \mathbf{I}_n on identiteettimatriisi ja $\mathbf{1}_{n \times n} = \mathbf{1}_n \mathbf{1}_n^\top$ on $n \times n$ kokoinen ykkösmatriisi.

Keskitysmatriisi siirtää matriisin arvoja siten, että matriisin sarakkeiden keskiarvoksi tulee arvo 0. Keskitettyjä hypoteettisia koordinaatteja merkitään jatkossa

$$\tilde{\mathbf{Y}} = \mathbf{C} \mathbf{Y}. \quad (2.4)$$

Lause 2.1.2. *Keskitysmatriisi \mathbf{C} on symmetrinen ja idempotentti, eli sillä suoritettava operaatio tuottaa saman tuloksen riippumatta siitä, suoritetaanko se yhden vai useamman kerran.*

Todistus. Matriisi \mathbf{C} on symmetrinen, sillä

$$\mathbf{C}^\top = \left(\mathbf{I}_n - \frac{1}{n} \mathbf{1}_{n \times n} \right)^\top = \mathbf{I}_n^\top - \frac{1}{n} \mathbf{1}_{n \times n}^\top = \mathbf{I}_n - \frac{1}{n} \mathbf{1}_{n \times n} = \mathbf{C}.$$

Matriisin \mathbf{C} on idempotentti, sillä

$$\begin{aligned}
 \mathbf{C}\mathbf{C} &= \left(\mathbf{I}_n - \frac{1}{n}\mathbf{1}_{n \times n}\right) \left(\mathbf{I}_n - \frac{1}{n}\mathbf{1}_{n \times n}\right) \\
 &= \mathbf{I}_n \left(\mathbf{I}_n - \frac{1}{n}\mathbf{1}_{n \times n}\right) - \frac{1}{n}\mathbf{1}_{n \times n} \left(\mathbf{I}_n - \frac{1}{n}\mathbf{1}_{n \times n}\right) \\
 &= \mathbf{I}_n\mathbf{I}_n - \frac{1}{n}\mathbf{I}_n\mathbf{1}_{n \times n} - \frac{1}{n}\mathbf{1}_{n \times n}\mathbf{I}_n + \frac{1}{n^2}\mathbf{1}_n \underbrace{\mathbf{1}_n^\top \mathbf{1}_n}_{=n} \mathbf{1}_n^\top \\
 &= \mathbf{I}_n - \frac{2}{n}\mathbf{1}_{n \times n} + \frac{1}{n}\mathbf{1}_{n \times n} \\
 &= \mathbf{I}_n - \frac{1}{n}\mathbf{1}_{n \times n} \\
 &= \mathbf{C}.
 \end{aligned}$$

□

Lause 2.1.3. *Koordinaattimatriisin \mathbf{Y} kertominen keskitysmatriisilla \mathbf{C} ei muuta koordinaattipisteiden välisiä etäisyyksiä.*

Todistus. Olkoon keskitetty koordinaattimatriisi

$$\begin{aligned}
 \tilde{\mathbf{Y}} &= \mathbf{C}\mathbf{Y} \\
 &= \left(\mathbf{I}_n - \frac{1}{n}\mathbf{1}_{n \times n}\right) \mathbf{Y} \\
 &= \mathbf{I}_n \mathbf{Y} - \frac{1}{n}\mathbf{1}_{n \times n} \mathbf{Y} \\
 &= \mathbf{Y} - \frac{1}{n}\mathbf{1}_{n \times n} \mathbf{Y}.
 \end{aligned}$$

Yhtälön oikean puolen toinen termi voidaan esittää muodossa

$$\frac{1}{n}\mathbf{1}_{n \times n} \mathbf{Y} = \mathbf{1}_n \left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{y}_{i,1} \quad \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{y}_{i,2} \quad \cdots \quad \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{y}_{i,m} \right] = \mathbf{1}_n \bar{\mathbf{y}}^\top. \quad (2.5)$$

Keskitetyn koordinaattimatriisin $\tilde{\mathbf{Y}}$ mielivaltaisten koordinaattiparien i ja j välisen etäisyyden neliö on

$$\begin{aligned}
 \|\tilde{\mathbf{y}}_i - \tilde{\mathbf{y}}_j\|^2 &= (\tilde{\mathbf{y}}_i - \tilde{\mathbf{y}}_j)^\top (\tilde{\mathbf{y}}_i - \tilde{\mathbf{y}}_j) \\
 &= ((\mathbf{y}_i - \bar{\mathbf{y}}) - (\mathbf{y}_j - \bar{\mathbf{y}}))^\top ((\mathbf{y}_i - \bar{\mathbf{y}}) - (\mathbf{y}_j - \bar{\mathbf{y}})) \\
 &= (\mathbf{y}_i - \mathbf{y}_j)^\top (\mathbf{y}_i - \mathbf{y}_j) \\
 &= \|\mathbf{y}_i - \mathbf{y}_j\|^2.
 \end{aligned}$$

□

Kun merkitään keskitettyjen koordinaattien $\tilde{\mathbf{Y}}$ alkioittain neliöityä etäisyysmatriisia merkinnällä $\tilde{\mathbf{D}}^{(2)}$, lauseesta 2.1.3 seuraa, että

$$\mathbf{D}^{(2)} = \tilde{\mathbf{D}}^{(2)}.$$

Lause 2.1.4. [4, s. 262] *Keskitysmatriisin \mathbf{C} ja matriisin \mathbf{Z} transpoosin tulo on $n \times n$ kokoinen nollamatriisi. Vastaavasti matriisin \mathbf{Z} ja keskitysmatriisin \mathbf{C} tulo on nollamatriisi. Toisin sanoen*

$$\mathbf{C}\mathbf{Z}^\top = \mathbf{0} \text{ ja } \mathbf{Z}\mathbf{C} = \mathbf{0}.$$

Todistus. Kun käytetään hyväksi ykkösmatriisilla kertomisen ominaisuuksia, suoraan laskemalla saadaan

$$\begin{aligned} \mathbf{C}\mathbf{Z}^\top &= \left(\mathbf{I}_n - \frac{1}{n} \mathbf{1}_n \mathbf{1}_n^\top \right) \mathbf{1}_n \left[\|\mathbf{x}_i\|^2 \right]^\top \\ &= \left(\mathbf{I}_n \mathbf{1}_n - \frac{1}{n} \mathbf{1}_n n \right) \left[\|\mathbf{x}_i\|^2 \right]^\top \\ &= (\mathbf{1}_n - \mathbf{1}_n) \left[\|\mathbf{x}_i\|^2 \right]^\top \\ &= \mathbf{0}. \end{aligned}$$

Koska tulon $\mathbf{C}\mathbf{Z}^\top$ transpoosi on tulo $\mathbf{Z}\mathbf{C}$, saadaan

$$\mathbf{Z}\mathbf{C} = (\mathbf{C}\mathbf{Z}^\top)^\top = \mathbf{0}^\top = \mathbf{0}.$$

□

Lause 2.1.4 sekä keskitysmatriisin idempotenssi antavat motiivin kertoa yhtälö (2.1) molemmilta puolilta keskitysmatriisilla [4]:

$$\mathbf{C}\mathbf{D}^{(2)}\mathbf{C} = \mathbf{C}(\mathbf{Z} - 2\mathbf{Y}\mathbf{Y}^\top + \mathbf{Z}^\top)\mathbf{C} = -2\tilde{\mathbf{Y}}\tilde{\mathbf{Y}}^\top.$$

Siten apumatriisi \mathbf{B} voidaan muotoilla pelkästään etäisyysmatriisin ja keskitysmatriisin avulla:

$$\mathbf{B} = -\frac{1}{2}\mathbf{C}\mathbf{D}^{(2)}\mathbf{C} = \tilde{\mathbf{Y}}\tilde{\mathbf{Y}}^\top. \quad (2.6)$$

Koska matriisi \mathbf{B} on symmetrinen, ovat sen ominaisarvot reaalisia [4].

Lause 2.1.5. *Matriisin \mathbf{B} ominaisarvot ovat ei-negatiivisia, jos matriisi $\mathbf{D}(\mathbf{Y})$ on euklidinen etäisyysmatriisi.*

Todistus. Olkoon vektori $\mathbf{v} \neq \mathbf{0}$ matriisin \mathbf{B} ominaisvektori. Tällöin

$$\mathbf{B}\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}. \quad (2.7)$$

Kertomalla yhtälön (2.7) molemmat puolet vasemmalta vektorin \mathbf{v} transpoosilla saadaan

$$\mathbf{v}^\top \mathbf{B}\mathbf{v} = \lambda \mathbf{v}^\top \mathbf{v}.$$

Koska matriisi \mathbf{D} on euklidinen etäisyysmatriisi, voidaan matriisi \mathbf{B} ilmaista yhtälön (2.6) mukaisesti $\mathbf{B} = \tilde{\mathbf{Y}}\tilde{\mathbf{Y}}^\top$, jolloin

$$\mathbf{v}^\top \tilde{\mathbf{Y}}\tilde{\mathbf{Y}}^\top \mathbf{v} = \lambda \|\mathbf{v}\|^2. \quad (2.8)$$

Merkitään $\mathbf{z} = \tilde{\mathbf{Y}}^\top \mathbf{v}$, jolloin yhtälö (2.8) saadaan muotoon

$$\mathbf{z}^\top \mathbf{z} = \lambda \|\mathbf{v}\|^2,$$

josta seuraa

$$\lambda = \frac{\|\mathbf{z}\|^2}{\|\mathbf{v}\|^2} \geq 0.$$

□

Jos oletetaan, että etäisyysmatriisi \mathbf{D} tunnetaan, voidaan keskitettyjen koordinaattien $\tilde{\mathbf{Y}}$ ratkaisemiseksi käyttää ominaisarvohajotelmaa [4], joka etsii yhtälön (2.6) optimaalisimman ratkaisun. Matriisille \mathbf{B} voidaan siis kirjoittaa ominaisarvohajotelma:

$$\tilde{\mathbf{Y}}\tilde{\mathbf{Y}}^\top = \mathbf{B} = \mathbf{V}\mathbf{\Lambda}\mathbf{V}^\top = (\mathbf{V}\mathbf{\Lambda}^{1/2})(\mathbf{\Lambda}^{1/2}\mathbf{V}^\top),$$

missä $\mathbf{\Lambda}$ on $m \times m$ kokoinen diagonaalimatriisi, jossa diagonaalilla on matriisin \mathbf{B} positiiviset ominaisarvot $\lambda_1, \dots, \lambda_m$ suuruusjärjestyksessä ja m on matriisin \mathbf{B} positiivisten ominaisarvojen lukumäärä. Matriisi \mathbf{V} on puolestaan $n \times m$ -matriisi, joka koostuu ominaisarvoja $\lambda_1, \dots, \lambda_m$ vastaavista matriisin \mathbf{B} ominaisvektoreista $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_m$. Koordinaatit $\tilde{\mathbf{Y}}$ voidaan nyt ratkaista laskemalla

$$\tilde{\mathbf{Y}} = \mathbf{V}\mathbf{\Lambda}^{1/2}. \quad (2.9)$$

Moniulotteisessa skaalauksessa alkutilanteessa tiedetään kuitenkin etäisyysmatriisin \mathbf{D} sijasta erilaisuusmatriisi $\mathbf{\Delta}$, joka ei välttämättä ole euklidinen. Klassisessa moniulotteisessa skaalauksessa tulokoordinaatit $\tilde{\mathbf{Y}}$ arvioidaan erilaisuusmatriisin $\mathbf{\Delta}$ avulla, jolloin matriisi \mathbf{B}_Δ lasketaan kaavalla

$$\mathbf{B}_\Delta = -\frac{1}{2}\mathbf{C}\mathbf{\Delta}^{(2)}\mathbf{C}. \quad (2.10)$$

Tuntemattomat tuloskoordinaatit $\tilde{\mathbf{Y}}$ lasketaan kuten kaavassa (2.9). Kuitenkin jos matriisilla \mathbf{B}_Δ on negatiivisia ominaisarvoja, ne hylätään virheenä. Tuloskoordinaattien $\tilde{\mathbf{Y}}$ dimensio on siten maksimissaan matriisin \mathbf{B}_Δ positiivisten ominaisarvojen lukumäärä.

On todistettu [4, s. 262–263], että klassinen moniulotteinen skaalauksen algoritmin ratkaisu $\tilde{\mathbf{Y}}$ minimoi funktion

$$\begin{aligned}\Sigma^2(\mathbf{D}, \mathbf{\Delta}) &= \left\| -\frac{1}{2}\mathbf{C} \left(\mathbf{D}^{(2)}(\mathbf{Y}) - \mathbf{\Delta}^{(2)} \right) \mathbf{C} \right\|^2 \\ &= \|\tilde{\mathbf{Y}}\tilde{\mathbf{Y}}^\top - \mathbf{B}_\Delta\|^2.\end{aligned}\tag{2.11}$$

Jos erilaisuusmatriisi $\mathbf{\Delta}$ on hypoteettisista koordinaateista \mathbf{X} muodostettu euklidinen etäisyysmatriisi, ovat klassisen moniulotteisen skaalauksen tuloskoordinaatit $\tilde{\mathbf{Y}}$ keskitetyt ja koordinaatteihin \mathbf{X} verrattuna eri rotaatiossa.

Yhteenvedona klassiseen moniulotteisen skaalauksen ongelmaan voidaan siis muodostaa seuraava algoritmi [4, s. 262]:

Algoritmi 1 Klassinen moniulotteinen skaalaus

Input: Erilaisuusmatriisi $\mathbf{\Delta} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ (Määritelmä 2.2).

Output: Koordinaatit $\tilde{\mathbf{Y}}$.

- 1: Muodosta keskitysmatriisi $\mathbf{C} = \mathbf{I}_n - \frac{1}{n}\mathbf{1}_{n \times n}$ (2.3).
 - 2: Muodosta matriisi $\mathbf{B}_\Delta = -\frac{1}{2}\mathbf{C}\mathbf{\Delta}^{(2)}\mathbf{C}$ (2.10).
 - 3: Laske matriisille \mathbf{B}_Δ ominaisarvot λ_i ja ominaisvektorit \mathbf{v}_i .
 - 4: Järjestä positiiviset ominaisarvot suuruusjärjestykseen matriisiin $\mathbf{\Lambda} = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_m)$ ja niitä vastaavat ominaisvektorit vastaavassa järjestyksessä matriisiin $\mathbf{V} = [\mathbf{v}_1 \ \dots \ \mathbf{v}_m]$.
 - 5: Laske koordinaatit $\tilde{\mathbf{Y}} = \mathbf{V}\mathbf{\Lambda}^{1/2}$ (2.9).
-

Klassisen moniulotteisen skaalauksen tuloskoordinaattien dimensiolle m pätee ehto $m < n$, missä n on koordinaattipisteiden lukumäärä. Usein koordinaattipisteiden halutaan kuvaavan todellisen maailman koordinaatteja tai niitä halutaan arvioida muuten visuaalisesti. Tällöin on sovelluksen kannalta hyödyllistä, jos moniulotteisen skaalauksen tuloskoordinaatit $\tilde{\mathbf{Y}}$ ovat korkeintaan kolmiulotteiset. Lopullisiksi tuloskoordinaateiksi voidaan valita koordinaattien $\tilde{\mathbf{Y}}$ l ensimmäistä saraketta, kun $l \leq m$. Vaihtoehtoisesti algoritmin kohdassa 4 voidaan valita $m:n$ sijasta l suurinta positiivista ominaisarvoa matriisiin $\mathbf{\Lambda}$ sekä niitä vastaavat l ominaisvektoria matriisiin \mathbf{V} ja laskea algoritmin kohta 5 käyttäen näitä matriiseja. Dimensio l tulee valita sopivaa tieteellistä arviointia käyttäen. [29]

2.1.3 Iteratiiviset moniulotteisen skaalauksen algoritmit

Klassisen moniulotteisen skaalauksen rinnalle on kehitetty lukuisia iteratiivisia menetelmiä moniulotteisen skaalauksen suorittamiseksi (esimerkiksi tutkimukset [8, 9, 11, 12, 25, 39, 40]). Nämä iteratiiviset algoritmit ovat hyödyllisiä erityisesti tapauksissa, joissa ei tiedetä kaikkien aineiston pisteiden välisiä samankaltaisuuksia tai erilaisuuksia. Tällaisessa tilanteessa erilaisuusmatriisi Δ sisältää määrittelemättömiä arvoja, eikä siihen siksi voi hyödyntää klassisen moniulotteisen skaalauksen algoritmia. Iteratiivisista moniulotteisen skaalauksen algoritmeista käytetään myös termiä epäklassinen.

Iteratiivisen moniulotteisen skaalauksen avulla pyritään etsimään paras mahdollinen koordinaattipiste-esitys aineistolle minimoimalla n.s. stressiä iteraatio kerrallaan. Stressi kuvaa tulskoordinaattien välisten etäisyyksien ja algoritmillemme syötettyjen erilaisuuksien välistä eroa. Epäklassisen skaalauksen lopputuloksen onnistumiseen vaikuttavia algoritmisia tekijöitä ovat ensimmäisen iteraatiovaiheen koordinaattipisteiden estimointimenetelmä, stressin valinta sekä stressin minimointimenetelmä.

Klassinen moniulotteinen skaalaus minimoi stressin (2.11), jota usein kirjallisuudessa kutsutaan nimellä *strain* [4, 7]. Kirjallisuudessa iteratiivisten algoritmien käyttämiä stressifunktioita ovat esimerkiksi *stress*, *raw stress* (2.13) ja *Sammon* [1, 4, 29]. Minimointimenetelmistä puolestaan ensimmäisenä esiteltiin gradientti- eli jyrkimmän laskun menetelmä stressin minimoimiseksi ("Steepest Descent") vuosina 1964 ja 1968 Kruskalin ja Guttmanin toimesta [4, 29, 30]. Myöhemmin vuodesta 1977 alkaen De Leeuw ja Heiser kirjoittivat artikkeleita SMACOF-menetelmästä stressin minimoimiseksi, joka osoittautui tehokkaaksi minimointitavaksi [4, 14].

Epäklassisessa moniulotteisessa skaalauksessa on lisäksi mahdollista antaa erilaisuuksille painot, jotka ilmaisevat todennäköisyyttä erilaisuuden paikkansapitävyydelle. Tällöin algoritmia kutsutaan painotetuksi moniulotteiseksi skaalaukseksi. Painoton epäklassinen tapaus saadaan painotetun skaalauksen erikoistapauksena, kun kaikille samankaltaisuuksille annetaan painoksi arvo 1.

2.1.4 Moniulotteinen skaalaus SMACOF-menetelmällä

Tässä kappaleessa esitellään iteratiivisia menetelmiä käyttävien moniulotteisen skaalauksen algoritmien toimintaperiaate paneutuen erityisesti SMACOF-menetelmään (Scaling by Majorizing Complicated Function). SMACOF-menetelmässä stressifunktion minimointimenetelmänä käytetään alun perin De Leeuw'n [14] kehittämää iteratiivista majorisaatiomenetelmää, joka on tehokas ja nopea suppenemaan [40, 4] s.

187]. Päälähteenä kappaleessa on käytetty kirjaa *Modern multidimensional scaling* [4, s. 185–192].

Määritellään aineisto, jolle moniulotteinen skaalaus suoritetaan, kuten kappaleessa 2.1.1. Määritellään erilaisuusmatriisi Δ kuten määritelmässä 2.2, mutta lisäksi sallitaan joidenkin erilaisuuksista $\delta_{i,j}$ olevan tuntemattomia. Muilta osin kappaleen 2.1.1 määritelmät pätevät sellaisinaan.

Määritelmä 2.9. *Painomatriisi* [4, s. 187] \mathbf{W} on $n \times n$ kokoinen symmetrinen ja redusoitumaton matriisi [17, s. 268], johon on järjestetty samankaltaisuuksiin $\delta_{i,j}$ liittyvät ei-negatiiviset painot $w_{i,j}$:

$$\mathbf{W} = [w_{i,j}] = \begin{bmatrix} w_{1,1} & w_{1,2} & \cdots & w_{1,n} \\ w_{2,1} & w_{2,2} & \cdots & w_{2,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ w_{n,1} & w_{n,2} & \cdots & w_{n,n} \end{bmatrix}.$$

Erilaisuutta $\delta_{i,j}$ vastaava paino $w_{i,j}$ kuvaa erilaisuustiedon varmuutta. Mitä suurempi paino on, sitä todennäköisemmin sitä vastaavan erilaisuuden oletetaan pitävän paikkaansa. Tapauksessa, jossa kaikki painot $w_{i,j}$ saavat arvon 1, käyttäytyy algoritmi painottomasti. Jos erilaisuutta $\delta_{i,j}$ ei ole määritetty, määritellään sitä vastaavaksi painoksi $w_{i,j} = 0$.

Kuten klassisessa moniulotteisessa skaalauksessa, on nytkin tavoitteena löytää koordinaatit \mathbf{Y} , joiden väliset etäisyydet $d_{i,j}$ vastaavat mahdollisimman hyvin niiden erilaisuuksia $\delta_{i,j}$. Stressifunktio, jolla arvioidaan etäisyyksien ja erilaisuuksien välistä eroa, voidaan määrittää lukuisilla eri tavoilla. Tässä esimerkissä arvioimiseen käytetään niin kutsuttua raakaa stressifunktiota, joka johdetaan seuraavaksi.

Merkitään kahden pisteen i ja j välisen erilaisuuden ja etäisyyden välistä virhettä

$$e_{i,j}^2 = (\delta_{i,j} - d_{i,j})^2.$$

Laskemalla yhteen kaikkiin etäisyyksiin liittyvät virheet saadaan laskettua virhearvio suoritettulle moniulotteiselle skaalaukselle. Siten koordinaatteihin \mathbf{Y} liittyvä kokonaisvirhe voidaan ilmaista

$$\sigma = \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n e_{i,j}^2 = \sum_{i < j} (\delta_{i,j} - d_{i,j})^2, \quad (2.12)$$

jossa summassa on vain termejä $\delta_{i,j}$, jotka ovat tunnettuja [4, s. 170–171]. Merkin-

nällä $\sum_{i<j}$ tarkoitetaan kaikkien niiden alkioiden summaa, joille pätee ehto $i < j$, sillä on riittävää laskea summa vain puolelle aineistosta etäisyyksien ja erilaisuuksien ollessa symmetrisiä määritelmänsä mukaan.

Kaavassa (2.12) on huomioitava, että virhettä $e_{i,j}^2$ ei voida laskea, jos erilaisuutta $\delta_{i,j}$ ei ole määritetty. Siten summaan σ ei lasketa mukaan määrittelemättömiä virheitä. Lisäämällä kaavaan (2.12) virheen kertoimeksi sitä vastaava kiinteä paino $w_{i,j}$ ja antamalla painon arvoksi 0, jos sitä vastaavaa erilaisuutta ei ole määritetty ja arvo 1, ellei painoa ole muuten määritetty, saadaan muodostettua *raaka stressifunktio*.

Määritelmä 2.10. Koordinaattimatriisin \mathbf{Y} etäisyyksien $d_{i,j}(\mathbf{Y})$ ja niitä vastaavien erilaisuuksien $\delta_{i,j}$ välinen *raaka stressi* [30, 4, s. 171] σ_r ilmaistaan

$$\sigma_r(\mathbf{Y}) = \sum_{i<j} w_{i,j} (\delta_{i,j} - d_{i,j}(\mathbf{Y}))^2, \quad (2.13)$$

missä paino $w_{i,j}$ on aina ei-negatiivinen ja saa arvon nolla, jos sitä vastaavaa erilaisuutta $\delta_{i,j}$ ei ole määritetty.

Seuraava minimointialgoritmi olettaa, että koordinaatit \mathbf{Z} ovat jokin arvio koordinaateista, joille $\mathbf{D}(\mathbf{Z}) \approx \mathbf{\Delta}$. Seuraavaksi pyritään etsimään koordinaatit \mathbf{Y} jolle laskettu raaka stressi $\sigma_r(\mathbf{Y})$ olisi pienempi kuin matriisille \mathbf{Z} laskettu raaka stressi $\sigma_r(\mathbf{Z})$. Kirjoitetaan koordinaattien \mathbf{Y} raaka stressi auki ja pyritään arvioimaan sitä ylöspäin funktion $\tau(\mathbf{Y}, \mathbf{Z})$ avulla. Siis

$$\begin{aligned} \sigma_r(\mathbf{Y}) &= \sum_{i<j} w_{i,j} (\delta_{i,j} - d_{i,j}(\mathbf{Y}))^2 \\ &= \sum_{i<j} w_{i,j} \delta_{i,j}^2 + \sum_{i<j} w_{i,j} d_{i,j}^2(\mathbf{Y}) - 2 \sum_{i<j} w_{i,j} \delta_{i,j} d_{i,j}(\mathbf{Y}) \\ &= \eta_\delta^2 + \eta_d^2(\mathbf{Y}) - 2\rho(\mathbf{Y}) \\ &\leq \tau(\mathbf{Y}, \mathbf{Z}), \end{aligned}$$

kun määritellään

$$\begin{cases} \eta_\delta^2 &= \sum_{i<j} w_{i,j} \delta_{i,j}^2 \\ \eta_d^2(\mathbf{Y}) &= \sum_{i<j} w_{i,j} d_{i,j}^2(\mathbf{Y}) \\ \rho(\mathbf{Y}) &= \sum_{i<j} w_{i,j} \delta_{i,j} d_{i,j}(\mathbf{Y}). \end{cases}$$

Tavoitteena on nyt löytää yksinkertainen matriisiesitys funktiolle $\tau(\mathbf{Y}, \mathbf{Z})$. Tätä funktiota $\tau(\mathbf{Y}, \mathbf{Z})$ derivoimalla matriisin \mathbf{Y} suhteen ja etsimällä derivaatan nollakohta saadaan laskettua sen minimikohtaa vastaavat koordinaatit \mathbf{Y} .

Stressifunktion $\sigma_r(\mathbf{Y})$ ensimmäinen komponentti η_δ^2 on vakio, sillä se riippuu vain

kiinteistä painoista $w_{i,j}$ ja erilaisuuksista $\delta_{i,j}$, eikä ollenkaan koordinaateista \mathbf{Y} . Termi $\eta_d^2(\mathbf{Y})$ puolestaan on koordinaattien \mathbf{Y} etäisyyksien neliöiden $d_{i,j}^2$ painotettu summa ja kolmannen termin $\rho(\mathbf{Y})$ voidaan ajatella olevan etäisyyksien $d_{i,j}$ painotettu summa.

Tarkastellaan termiä $\eta_d^2(\mathbf{Y}) = \sum_{i < j} w_{i,j} d_{i,j}^2(\mathbf{Y})$. Tarkoittakoon merkintä \mathbf{y}_k nyt koordinaattimatriisin \mathbf{Y} jotakin saraketta k . Pisteiden i ja j välisen etäisyyden neliö $d_{i,j}^2$ voidaan ilmoittaa matriisin \mathbf{Y} sarakkeiden ja luonnollisten kantavektoreiden \mathbf{e}_i ja \mathbf{e}_j avulla:

$$\begin{aligned} d_{i,j}^2(\mathbf{Y}) &= \sum_{k=1}^m (y_{i,k} - y_{j,k})^2 = \sum_{k=1}^m \mathbf{y}_k^\top (\mathbf{e}_i - \mathbf{e}_j)(\mathbf{e}_i - \mathbf{e}_j)^\top \mathbf{y}_k \\ &= \sum_{k=1}^m \mathbf{y}_k^\top \mathbf{A}_{i,j} \mathbf{y}_k = \text{tr} \mathbf{Y}^\top \mathbf{A}_{i,j} \mathbf{Y}. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Yhtälössä (2.14) matriisi $\mathbf{A}_{i,j}$ on siten $n \times n$ kokoinen matriisi, jolle pätee $a_{i,i} = a_{j,j} = 1$, $a_{i,j} = a_{j,i} = -1$ ja jossa loput alkioit ovat nollia.

Termi $\eta_d^2(\mathbf{Y})$ saadaan nyt tiiviimpään muotoon

$$\begin{aligned} \eta_d^2(\mathbf{Y}) &= \sum_{i < j} w_{i,j} d_{i,j}^2(\mathbf{Y}) = \sum_{i < j} w_{i,j} \text{tr} \mathbf{Y}^\top \mathbf{A}_{i,j} \mathbf{Y} \\ &= \sum_{i < j} \text{tr} \mathbf{Y}^\top (w_{i,j} \mathbf{A}_{i,j}) \mathbf{Y} = \text{tr} \mathbf{Y}^\top \left(\sum_{i < j} w_{i,j} \mathbf{A}_{i,j} \right) \mathbf{Y} \\ &= \text{tr} \mathbf{Y}^\top \mathbf{V} \mathbf{Y}, \end{aligned} \quad (2.15)$$

missä

$$\mathbf{V} = \sum_{i < j} w_{i,j} \mathbf{A}_{i,j}.$$

Yleisesti matriisin \mathbf{V} alkioille pätee siis sääntö

$$\begin{cases} v_{i,j} = -w_{i,j} & , \text{ kun } i \neq j \\ v_{i,i} = \sum_{j=1, j \neq i}^n w_{i,j}. \end{cases}$$

Koska painomatriisi \mathbf{W} on määritelmänsä mukaan symmetrinen, on myös matriisi \mathbf{V} symmetrinen.

Siirrytään tarkastelemaan termiä $-\rho(\mathbf{Y}) = -\sum_{i < j} w_{i,j} \delta_{i,j} d_{i,j}(\mathbf{Y})$ ja pyritään arvioimaan sitä ylöspäin. Cauchyn–Schwarzin epäyhtälön avulla voidaan lausua

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^m (y_{i,k} - y_{j,k})(z_{i,k} - z_{j,k}) &\leq \left(\sum_{k=1}^m (y_{i,k} - y_{j,k})^2 \right)^{1/2} \left(\sum_{k=1}^m (z_{i,k} - z_{j,k})^2 \right)^{1/2} \\ &= d_{i,j}(\mathbf{Y}) d_{i,j}(\mathbf{Z}), \end{aligned} \quad (2.16)$$

jolle pätee yhtäsuuruus kun $\mathbf{Z} = \mathbf{Y}$. Ratkaisemalla epäyhtälöstä (2.16) etäisyys $d_{i,j}(\mathbf{Y})$ ja kertomalla se puolittain arvolla -1 , saadaan epäyhtälö

$$-d_{i,j}(\mathbf{Y}) \leq -\frac{\sum_{k=1}^m (y_{i,k} - y_{j,k})(z_{i,k} - z_{j,k})}{d_{i,j}(\mathbf{Z})} = \frac{\text{tr} \mathbf{Y}^\top \mathbf{A}_{i,j} \mathbf{Z}}{d_{i,j}(\mathbf{Z})},$$

kun oletetaan että jakaja $d_{i,j}(\mathbf{Z})$ ei ole nolla. Nyt voidaan arvioida termiä $-\rho(\mathbf{Y})$ ylöspäin.

$$\begin{aligned} -\rho(\mathbf{Y}) &= -\sum_{i < j} w_{i,j} \delta_{i,j} d_{i,j}(\mathbf{Y}) \\ &\leq -\sum_{i < j} w_{i,j} \delta_{i,j} \frac{\text{tr} \mathbf{Y}^\top \mathbf{A}_{i,j} \mathbf{Z}}{d_{i,j}(\mathbf{Z})} \\ &= -\text{tr} \mathbf{Y}^\top \left(\sum_{i < j} \frac{w_{i,j} \delta_{i,j} \mathbf{A}_{i,j}}{d_{i,j}(\mathbf{Z})} \right) \mathbf{Z} \\ &= -\text{tr} \mathbf{Y}^\top \mathbf{B}(\mathbf{Z}) \mathbf{Z}, \end{aligned} \tag{2.17}$$

missä matriisille $\mathbf{B}(\mathbf{Z})$ pätee

$$\begin{cases} b_{i,j} = \begin{cases} -\frac{w_{i,j} \delta_{i,j}}{d_{i,j}(\mathbf{Z})} & \text{kun } i \neq j \text{ ja } d_{i,j}(\mathbf{Z}) \neq 0 \\ 0 & \text{kun } i \neq j \text{ ja } d_{i,j}(\mathbf{Z}) = 0 \end{cases} \\ b_{i,i} = -\sum_{j=i,j \neq i}^n b_{i,j}. \end{cases}$$

Koska epäyhtälön (2.17) molemmat puolet ovat yhtä suuret, kun $\mathbf{Z} = \mathbf{Y}$, saadaan termille $\rho(\mathbf{Y})$ majorisointierisuuruus

$$\rho(\mathbf{Y}) = -\text{tr} \mathbf{Y}^\top \mathbf{B}(\mathbf{Y}) \mathbf{Y} \leq -\text{tr} \mathbf{Y}^\top \mathbf{B}(\mathbf{Z}) \mathbf{Z}.$$

Yhdistämällä kaavat (2.15) ja (2.17) vakioon η_δ^2 saadaan muodostettua funktio $\tau(\mathbf{Y}, \mathbf{Z})$ ja siten epäyhtälö

$$\begin{aligned} \sigma_r(\mathbf{Y}) &= \eta_\delta^2 + \eta_d^2(\mathbf{Y}) - 2\rho(\mathbf{Y}) \\ &= \eta_\delta^2 + \text{tr} \mathbf{Y}^\top \mathbf{V} \mathbf{Y} - 2\text{tr} \mathbf{Y}^\top \mathbf{B}(\mathbf{Y}) \mathbf{Y} \\ &\leq \eta_\delta^2 + \text{tr} \mathbf{Y}^\top \mathbf{V} \mathbf{Y} - 2\text{tr} \mathbf{Y}^\top \mathbf{B}(\mathbf{Z}) \mathbf{Z} = \tau(\mathbf{Y}, \mathbf{Z}). \end{aligned}$$

Funktio $\tau(\mathbf{Y}, \mathbf{Z})$ on nyt stressin majorisointifunktio, joka on toisen asteen funktio ja siten helposti käsiteltävä. Jotta löydetään sellainen \mathbf{Y} , joka minimoi funktion $\tau(\mathbf{Y}, \mathbf{Z})$, derivoidaan funktio $\tau(\mathbf{Y}, \mathbf{Z})$ matriisiin \mathbf{Y} suhteen [34] ja asetetaan derivaatta nolllaksi. Saadaan

$$\frac{\partial \tau(\mathbf{Y}, \mathbf{Z})}{\partial \mathbf{Y}} = 2\mathbf{V} \mathbf{Y} - 2\mathbf{B}(\mathbf{Z}) \mathbf{Z} = \mathbf{0},$$

joten

$$\mathbf{V}\mathbf{Y} = \mathbf{B}(\mathbf{Z})\mathbf{Z}. \quad (2.18)$$

Koska matriisi \mathbf{V} ei ole kääntyvä, ei yhtälöstä voida ratkaista matriisia \mathbf{Y} kertomalla yhtälön (2.18) molempia puolia käänteismatriisilla \mathbf{V}^{-1} . Sen sijaan määritellään matriisille \mathbf{V} Moore-Penrose-inverssi

$$\mathbf{V}^+ = (\mathbf{V} + \mathbf{1}_{n \times n})^{-1} - n^{-2} \mathbf{1}_{n \times n}$$

ja ratkaistaan yhtälöstä (2.18) matriisi \mathbf{Y} käyttäen sitä. Nyt jos oletetaan, että SMACOF-algoritmin edellisen iteraation $u - 1$ ratkaisu olivat koordinaatit \mathbf{Z} , saadaan iteraatiolle u päivitettyä koordinaatit

$$\mathbf{Y}^{[u]} = \mathbf{V}^+ \mathbf{B}(\mathbf{Z})\mathbf{Z}. \quad (2.19)$$

Tapauksessa, jossa kaikille painoille pätee $w_{i,j} = 1$, yksinkertaistuu yhtälö (2.19) muotoon

$$\mathbf{Y}^{[u]} = n^{-1} \mathbf{B}(\mathbf{Z})\mathbf{Z}. \quad (2.20)$$

Algoritmi takaa, että stressin $\sigma_r(\mathbf{Y})$ arvo laskee jokaisella iteraatiokerralla, kunnes pätee $\mathbf{Y}^{[u]} = \mathbf{V}^+ \mathbf{B}(\mathbf{Y})\mathbf{Y}$. Jo yhden askeleen jälkeen koordinaattimatriisi \mathbf{Y} on keskitetty, vaikka koordinaatit \mathbf{Z} eivät olisi keskitetyt [4, s. 191]. Klassisen moniulotteisen skaalauksen tuloskoordinaattien tavoin myös iteratiivisia menetelmiä käytettäessä tuloskoordinaatit ovat satunnaisessa rotaatiossa. Lisäksi iteratiivisten menetelmien tuloskoordinaatit voivat olla eri reflektiossa suhteessa hypoteettisiin koordinaatteihin \mathbf{X} .

Moniulotteisen skaalauksen algoritmit saattavat päätyä globaalin minimin sijasta lokaaliin minimiin. Iteratiivisia menetelmiä käytettäessä aloituskoordinaatit $\mathbf{Y}^{[0]}$ ovat merkittävässä osassa siinä, mihin minimiin päädytään erityisesti jos stressin minimointiin käytetään gradienttimetodia [29]. Täysin satunnaisesti valitut aloituskoordinaatit eivät mitä todennäköisimmin ole paras vaihtoehto aloituskoordinaateille. [4, s. 277]

Eräs vaihtoehto aloituskoordinaattien etsimiselle on suorittaa aluksi jokin toinen moniulotteisen skaalauksen algoritmi. Tämä menetelmä ei kuitenkaan takaa globaalia minimiä. [4, s. 277]

Toisessa vaihtoehtoisessa menetelmässä käytetään aloituskoordinaatteina satunnaisia koordinaatteja, mutta toistetaan iteratiivinen moniulotteisen skaalauksen algoritmi useita, esimerkiksi satoja, kertoja [4, s. 277–278]. Saaduista vaihtoehdoista valitaan tulos, jolla on pienin stressi. Tämä metodi antaa yleensä hyviä tuloksia, mutta

on laskennallisesti raskas. Groenen ja Heiserin simulaatiotutkimuksista [18] saatiin erääksi tulokseksi, että SMACOF-menetelmällä minimoimalla useimmat satunnaiset aloituskoordinaatit päätyivät globaaliin minimiin dimensiosta riippumatta. Tällöin on hyvin todennäköistä, että tarpeeksi suurella iteraatiomäärällä löydetään globaali minimi.

Kolmas vaihtoehto aloituskoordinaattien etsinnälle on dimension vähentäminen [4, s. 277]. Se perustuu Groenen ja Heiserin simulaatiotutkimuksiin [18], joiden mukaan lokaaleja minimejä esiintyy todennäköisemmin matalissa kuin korkeissa dimensioissa. Tässä menetelmässä aloitetaan etsimällä aluksi korkean dimension koordinaatit ja suorittamalla niille MDS-analyysi. Otetaan sitten saadut tuloskoordinaatit, jotka ovat dimensionsa lokaali minimi, ja poistetaan niistä pienimmän varianssin dimensio. Suoritetaan sitten näille pienempidimensioisille koordinaateille iteratiivinen moniulotteisen skaalauksen algoritmi ja toistetaan sykliä, kunnes ollaan halutussa dimensiossa.

Iteratiivisessa menetelmässä on lisäksi oleellista määritellä algoritmin lopetusehto. Algoritmin suorittaminen lopetetaan, kun stressi on pienempi kuin suurin sallittu arvo ε , tai jos iteraatioita on jo suoritettu M kierrosta. Suurimman sallitun stressiarvon valintaan vaikuttaa moni muuttuja. Esimerkiksi mitä korkeampi on tuloskoordinaattien dimensio, sitä pienempi on stressi, ja mitä enemmän virhettä sisään tulevassa aineistossa on, sitä suurempi stressi on. [4, s. 54–55]

Algoritmissa [2] esitellään SMACOF-algoritmi moniulotteisen skaalauksen suorittamiseksi [4, s. 191–192]. Aloituskoordinaatit $\mathbf{Y}^{[0]}$ lasketaan esimerkiksi jollain edellä kuvatulla metodilla. Kaavaviitteet viittaavat SMACOF-metodin stressifunktioon ja sen minimointimenetelmään, mutta valitsemalla stressifunktion σ_r toisin ja vaihtamalla minimointimenetelmän (algoritmin kohta [7]) on algoritmin runko sovitettavissa muihin iteratiivisiin moniulotteisen skaalauksen tapauksiin.

2.2 Koordinaattien muunnosoperaatiot

Kappaleessa [2.1] esitellyillä moniulotteisen skaalauksen algoritmeilla tuotetut tuloskoordinaatit ovat kiertyneet, skaalautuneet, peilautuneet ja siirtyneet mielivaltaisesti verrattuna hypoteettisiin koordinaatteihin. Jos siis tällaiset hypoteettiset koordinaatit \mathbf{X} tunnetaan, on tarpeellista pystyä löytämään sopivat muunnosoperaatiot, joiden avulla eri koordinaatit saadaan vastaamaan toisiaan mahdollisimman hyvin tuloskoordinaattien suhteellisten etäisyyksien säilyessä.

Tässä kappaleessa esitellään matemaattiset apuvälineet koordinaattien muunnos-

Algoritmi 2 Moniulotteinen skaalaus SMACOF-menetelmällä

Input: Erilaisuusmatriisi $\Delta \in \mathbb{R}^{n \times n}$ (Määritelmä 2.2).
Painomatriisi $\mathbf{W} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ (Määritelmä 2.9).
Aloituskoordinaatit $\mathbf{Y}^{[0]}$.
Suurin sallittu virhe ε .
Suurin sallittu iteraatiomäärä M .

Output: Keskitetyt koordinaatit $\tilde{\mathbf{Y}}$.

- 1: Aseta $\mathbf{Z} = \mathbf{Y}^{[0]}$.
- 2: Aseta $k = 0$.
- 3: Laske stressi $\sigma^{[0]} = \sigma(\mathbf{Y}^{[0]})$. (2.13).
- 4: Aseta $\sigma^{[-1]} = \sigma^{[0]}$.
- 5: **while** $k = 0$ **or** $(\sigma^{[k-1]} - \sigma^{[k]} > \varepsilon$ **and** $k \leq M)$ **do**
- 6: Aseta $k = k + 1$.
- 7: Laske uudet koordinaatit $\mathbf{Y}^{[k]}$ käyttäen SMACOF-minimointimenetelmää:
Jos kaikki painot $w_{i,j} = 1$, käytä kaavaa (2.20), muuten laske kaavalla (2.19).
- 8: Laske stressi $\sigma^{[k]} = \sigma(\mathbf{Y}^{[k]})$ (2.13).
- 9: Aseta $\mathbf{Z} = \mathbf{Y}^{[k]}$.
- 10: **end while**
- 11: Aseta $\tilde{\mathbf{Y}} = \mathbf{Z}$

peraatioille. Ensin esitellään yksittäiset muunnoskomponentit. Tämän jälkeen esitellään Prokrustes-analyysi, jonka avulla peilaus- ja rotaatiokomponentit voidaan estimoida. Lopuksi luodaan algoritmi moniulotteisen skaalauksen tuloskoordinaattien muuntamiselle.

2.2.1 Skaalaus, peilaus, rotaatio ja siirtäminen

Koordinaatteja voidaan skaalata, kiertää, peilata ja siirtää ilman, että niiden väliset suhteet muuttuvat. Koordinaattien peilaaminen, kiertäminen ja siirtäminen ei muuta koordinaattipisteiden välisiä etäisyyksiä ja suhteellisia sijainteja toisiinsa nähden. Skaalaus muuttaa pisteiden välisiä etäisyyksiä, mutta jos skaalauksen tekee joka akselia kohden tasapuolisesti, eivät niiden väliset suhteet muutu.

Määritelmissä 2.11 - 2.14 oletetaan, että koordinaattimatriisi \mathbf{X} on määritelty kuten määritelmässä 2.1. Oletustapaus on lisäksi kolmiulotteinen eli määritelmän 2.1 dimensio $m = 3$.

Määritelmä 2.11. *Skaalausmatriisi* \mathbf{S} on 3×3 kokoinen diagonaalimatriisi, jonka diagonaalilla ovat positiiviset ja nollaa suuremmat skaalausvakiot s_x , s_y ja s_z kasvattavat tai kutistavat skaalattavaa objektia akselien x , y ja z suhteen [24]. Skaa-

lausmatriisi \mathbf{S} voidaan siis kirjoittaa

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} s_x & 0 & 0 \\ 0 & s_y & 0 \\ 0 & 0 & s_z \end{bmatrix}.$$

Skaalaus on vakio jos ja vain jos kaikki skaalausvakiot ovat yhtä suuria eli $s_x = s_y = s_z$. Tällöin muutos jokaista akselia kohden on sama, koordinaattipisteiden keskinäiset mittasuhteet eivät muutu ja skaalausmatriisin voi korvata vakiolla $s = s_x = s_y = s_z$.

Koordinaattimatriisin \mathbf{X} skaalaus skaalausmatriisilla \mathbf{S} suoritetaan kertomalla koordinaattimatriisi \mathbf{X} skaalausmatriisilla \mathbf{S} koordinaattimatriisin oikealta puolelta.

Määritelmä 2.12. *Peilausmatriisi* on 3×3 kokoinen diagonaalimatriisi \mathbf{P} , jolla kertomalla objekti peilautuu halutun tason suhteen [24]. Peilaus eli reflektio tasojen xy , xz ja yz suhteen suoritetaan 3×3 kokoisten peilausmatriisien \mathbf{P}_{xy} , \mathbf{P}_{xz} ja \mathbf{P}_{yz} avulla ja ne määritellään

$$\mathbf{P}_{xy} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{P}_{xz} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{P}_{yz} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Koordinaattimatriisin \mathbf{X} peilaus tason suhteen suoritetaan kertomalla se vastaavalla peilausmatriisilla oikealta puolelta. Peilausoperaatioita voidaan yhdistellä kertomalla niitä keskenään vapaassa järjestyksessä. Peilausmatriisi on ortogonaalinen.

Määritelmä 2.13. [24, 23] *Rotaatiomatriisi* \mathbf{R} on 3×3 kokoinen matriisi, joka kiertää objektia koordinaattiakselin tai -akselien ympäri. Kullekin akselille z , y ja x määritellään erikseen rotaatiomatriisi, joka kiertää objektia koordinaattiakselin ympäri kulman α , β tai γ verran suhteessa origoon. Rotaatiomatriisit akseleittain ovat

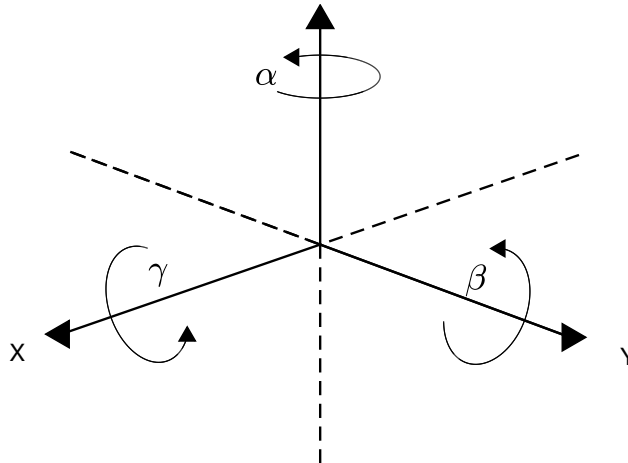
$$\mathbf{R}_z(\alpha) = \begin{bmatrix} \cos(\alpha) & \sin(\alpha) & 0 \\ -\sin(\alpha) & \cos(\alpha) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{R}_y(\beta) = \begin{bmatrix} \cos(\beta) & 0 & -\sin(\beta) \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin(\beta) & 0 & \cos(\beta) \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{R}_x(\gamma) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\gamma) & \sin(\gamma) \\ 0 & -\sin(\gamma) & \cos(\gamma) \end{bmatrix}.$$

Positiivisten kulmien α , β tai γ rotaatiosuunnat on esitetty kuvassa [1](#).

Koordinaattimatriisin \mathbf{X} kiertäminen suoritetaan kertomalla se vastaavalla rotaatiomatriisilla oikealta puolelta. Matriisi $\mathbf{R}_z(\alpha)$ muuttaa koordinaattien kallistusta, matriisi $\mathbf{R}_y(\beta)$ kaltevuutta ja matriisi $\mathbf{R}_x(\gamma)$ niiden kiertoa. Yleinen rotaatiomatriisi \mathbf{R} on jokin kombinaatio akselikohtaisten rotaatiomatriisien tulosta. Rotaation suoritusjärjestyksellä on merkitystä lopputuloksen kannalta (kuva [2](#)), sillä yleisesti rotaatiomatriisit eivät kommutoi [\[24\]](#). Lisäksi on huomioitava, että määritelmän [2.13](#) rotaatiomatriiseilla kertomalla koordinaattipisteet kiertyvät origon suhteen, jolloin lopputuloksen kannalta on merkityksellistä, missä suhteessa origoon koordinaatit sijaitsevat.



Kuva 1 Rotaatio-operaatioiden vaikutus ja positiiviset kiertosuunnat

Lause 2.2.1. Rotaatiomatriisi \mathbf{R} , joka koostuu akselikohtaisten rotaatiomatriisien tulosta, on ortogonaalinen.

Todistus. Matriisi \mathbf{R} on ortogonaalinen jos $\mathbf{R}^\top \mathbf{R} = \mathbf{I}$. Laskemalla matriisitulo au-
ki saadaan osoitettua, että kullekin akselikohtaiselle rotaatiomatriisille $\mathbf{R}_i(\theta)$ pätee $\mathbf{R}_i(\theta)^\top \mathbf{R}_i(\theta) = \mathbf{I}$. Esimerkiksi

$$\mathbf{R}_z(\alpha)^\top \mathbf{R}_z(\alpha) = \begin{bmatrix} \cos(\alpha) & -\sin(\alpha) & 0 \\ \sin(\alpha) & \cos(\alpha) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos(\alpha) & \sin(\alpha) & 0 \\ -\sin(\alpha) & \cos(\alpha) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

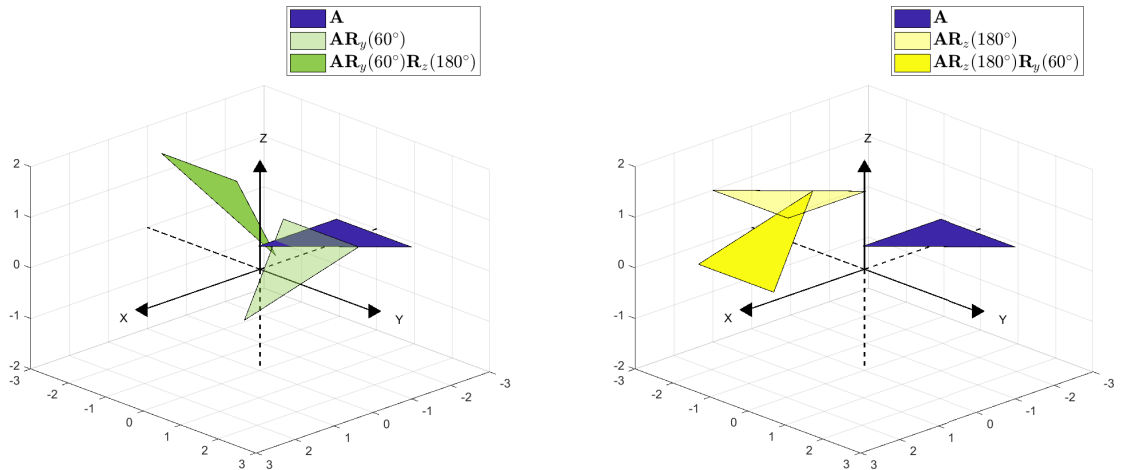
$$\begin{aligned}
&= \begin{bmatrix} \cos^2(\alpha) + \sin^2(\alpha) & \cos(\alpha) \sin(\alpha) - \cos(\alpha) \sin(\alpha) & 0 \\ \cos(\alpha) \sin(\alpha) - \cos(\alpha) \sin(\alpha) & \sin^2(\alpha) + \cos^2(\alpha) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \mathbf{I}.
\end{aligned}$$

Tulos voidaan osoittaa muille akselikohtaisille rotaatiomatriiseille $\mathbf{R}_y(\beta)$ ja $\mathbf{R}_x(\gamma)$ vastaavasti.

Lasketaan nyt tulo $\mathbf{R}^\top \mathbf{R}$ mielivaltaiselle rotaatiomatriisille \mathbf{R} , joka koostuu akselikohtaisten rotaatiomatriisien $\mathbf{R}_i(\theta)$ tulosta mielivaltaisessa järjestyksessä.

$$\begin{aligned}
\mathbf{R}^\top \mathbf{R} &= (\mathbf{R}_i(\phi) \mathbf{R}_j(\omega) \mathbf{R}_k(\theta))^\top (\mathbf{R}_i(\phi) \mathbf{R}_j(\omega) \mathbf{R}_k(\theta)) \\
&= \mathbf{R}_k(\theta)^\top \mathbf{R}_j(\omega)^\top \underbrace{\mathbf{R}_i(\phi)^\top \mathbf{R}_i(\phi)}_{=\mathbf{I}} \mathbf{R}_j(\omega) \mathbf{R}_k(\theta) \\
&= \mathbf{R}_k(\theta)^\top \underbrace{\mathbf{R}_j(\omega)^\top \mathbf{R}_j(\omega)}_{=\mathbf{I}} \mathbf{R}_k(\theta) \\
&= \mathbf{R}_k(\theta)^\top \mathbf{R}_k(\theta) \\
&= \mathbf{I}.
\end{aligned}$$

□



Kuva 2 Rotaatiojärjestys vaikuttaa lopputulokseen. Vasemmalla on ensin muutettu violetin objektin \mathbf{A} kaltevuutta, jonka jälkeen myös kallistusta on muutettu. Vasemmalla samat operaatiot on tehty toisin päin.

Määritelmä 2.14. [24] Olkoon t_x , t_y ja t_z vakioita, jotka osoittavat halutun siirron

määrän akseleita x , y ja z kohden ja olkoon vektori $\mathbf{t}^\top = [t_x \ t_y \ t_z]$. *Translaatiomatriisi*

$$\mathbf{T} = \mathbf{1}_n \mathbf{t}^\top \quad (2.21)$$

on $n \times 3$ kokoinen matriisi, missä n on siirrettävien koordinaattien alkioden määrä.

Koordinaatteja \mathbf{X} voidaan siirtää laskemalla koordinaattimatriisi \mathbf{X} ja translaatiomatriisi \mathbf{T} yhteen.

Kokonaisuudessaan koordinaattien muuntamisen voidaan ajatella koostuvan sarjasta skaalausta, peilausta, rotaatiota ja siirtämistä. Lopputuloksen kannalta edellä kuvattujen operaatioiden suoritusjärjestyksellä on merkitystä, sillä matriisitulo ei yleensä ole vaihdannainen. Koordinaattien sijainti origoon nähden vaikuttaa rotaation kiertymispisteeseen ja skaalaus siirtää koordinaattien keskipistettä, jos koordinaatit eivät ole origossa. Siksi operoitavan koordinaattimatriisin on oltava keskitetty ja siirtämisen tapahduttava viimeisenä, jotta operaatioista saadaan haluttu vaikutus. Tällöin muunnetut koordinaatit \mathbf{X} saadaan laskettua keskitetyistä koordinaateista $\tilde{\mathbf{X}}$ kaavalla $\mathbf{X} = \tilde{\mathbf{X}}\mathbf{SPR} + \mathbf{T}$, joka yleistyy muotoon

$$\mathbf{X} = s\tilde{\mathbf{X}}\mathbf{PR} + \mathbf{T}, \quad (2.22)$$

kun skaalaus on vakio.

2.2.2 Prokrustes-analyysi

Prokrustes-analyysin [36] avulla pyritään löytämään sellaiset matriisit $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ ja $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{n \times m}$, jotka toteuttavat yhtälön

$$\mathbf{YA} = \mathbf{X} + \mathbf{B},$$

missä matriisit \mathbf{Y} ja \mathbf{X} ovat tunnettuja koordinaattimatriiseja ja missä matriisi \mathbf{A} on ortogonaalinen eli toteuttaa ehdon $\mathbf{A}^\top \mathbf{A} = \mathbf{I}$. Ongelmana on minimoida funktio

$$\Sigma_{\mathbf{X}+\mathbf{B},\mathbf{YA}}^2 = \|\mathbf{X} + \mathbf{B} - \mathbf{YA}\|^2 = \sum_{i=1}^n \|\mathbf{x}_i^\top + \mathbf{b}^\top - \mathbf{y}_i^\top \mathbf{A}\|^2.$$

Aiemmin esitelty koordinaattien skaalaukseen, peilaukseen, rotaatioon ja siirtämiseen perustuva koordinaattien muunnoskaava (2.22) voidaan esittää muodossa

$$\begin{aligned} \mathbf{X} &= s\mathbf{YPR} + \mathbf{T} \\ \Leftrightarrow s\mathbf{YPR} &= \mathbf{X} - \mathbf{T}, \end{aligned}$$

kun skaalaus on vakio. Sekä rotaatiomatriisi \mathbf{R} että peilausmatriisi \mathbf{P} ovat ortogonaalisia, jolloin matriisitulolle \mathbf{PR} pätee $(\mathbf{PR})^\top(\mathbf{PR}) = \mathbf{I}$. Siten koordinaattien muunnos voidaan esittää Prokrustes-ongelmana. Jatkossa sovelluksen kolmiulotteisen luonteen vuoksi oletetaan että dimensio $m = 3$.

Schönemann [36] ehdotti ongelman ratkaisulle yleistä muotoa, joka hyödyntää matriisien ominaisarvohajotelmaa. Schönemannin algoritmista pyritään minimoimaan translaatiomatriisin \mathbf{B} jälki $\text{tr}\mathbf{B}$, mutta Schönemannin algoritmilla laskettu matriisi \mathbf{B} ei ole samassa muodossa kuin aiemmin (2.21) määritelty translaatiomatriisi \mathbf{T} , vaan jokaiselle koordinaattiparille \mathbf{x}_i ja \mathbf{y}_i lasketaan oma translaatiovektori.

Eggertin ym. [16] tutkimuksessa vertailtiin neljää algoritmia ongelman ratkaisemiseksi. Niistä ensimmäinen on Arun ym. [3] esittämä algoritmi ja se hyödyntää singulaariarvohajotelmaa. Kyseisessä algoritmista koordinaatit \mathbf{X} ja \mathbf{Y} on keskitetty, jolloin translaatiota \mathbf{T} ei huomioida minimoinnissa vaan se saadaan muiden esitetien avulla laskettua kaavan (2.21) osoittamassa muodossa. Koska rotaatio ja peilaus ovat riippumattomia skaalausvakioista, kun koordinaatit ovat keskitetyt ja rotaatio suoritetaan origon suhteen [41], voidaan Prokrustes-ongelma moniulotteisen skaalauksen tuloskoordinaateille $\tilde{\mathbf{Y}}$ kirjoittaa muotoon

$$\tilde{\mathbf{Y}}\mathbf{A} = \tilde{\mathbf{X}}.$$

Eggertin esittelemän Prokrustes-analyysin avulla voidaan siten ratkaista matriisi $\mathbf{A} = \mathbf{PR}$, joka minimoi funktion

$$\begin{aligned} \Sigma_{\tilde{\mathbf{X}}, \tilde{\mathbf{Y}}\mathbf{A}}^2 &= \|\tilde{\mathbf{X}} - \tilde{\mathbf{Y}}\mathbf{A}\|^2 = \sum_{i=1}^n \|\tilde{\mathbf{x}}_i^\top - \tilde{\mathbf{y}}_i^\top \mathbf{A}\|^2 \\ &= \sum_{i=1}^n \left(\tilde{\mathbf{x}}_i^\top \tilde{\mathbf{x}}_i + \tilde{\mathbf{y}}_i^\top \mathbf{A} \mathbf{A}^\top \tilde{\mathbf{y}}_i - 2\tilde{\mathbf{x}}_i^\top \mathbf{A}^\top \tilde{\mathbf{y}}_i \right) \\ &= \sum_{i=1}^n \left(\tilde{\mathbf{x}}_i^\top \tilde{\mathbf{x}}_i + \tilde{\mathbf{y}}_i^\top \tilde{\mathbf{y}}_i - 2\tilde{\mathbf{x}}_i^\top \mathbf{A}^\top \tilde{\mathbf{y}}_i \right), \end{aligned} \quad (2.23)$$

missä $\tilde{\mathbf{y}}_i$ on keskitytyn koordinaattimatriisin $\tilde{\mathbf{Y}}$ rivin i koordinaattivektori ja vektori $\tilde{\mathbf{x}}_i$ vastaavasti keskitytyn koordinaattimatriisin $\tilde{\mathbf{X}}$ rivin i koordinaattivektori.

Funktio $\Sigma_{\tilde{\mathbf{X}}, \tilde{\mathbf{Y}}\mathbf{A}}^2$ (2.23) minimoituu kun termi $F = \sum_{i=1}^n \tilde{\mathbf{x}}_i^\top \mathbf{A}^\top \tilde{\mathbf{y}}_i$ maksimoituu. Termi F voidaan muodostaa matriisin \mathbf{R} ja 3×3 -kokoisen matriisin

$$\mathbf{H} = \sum_{i=1}^n \tilde{\mathbf{y}}_i \tilde{\mathbf{x}}_i^\top = \tilde{\mathbf{Y}}^\top \tilde{\mathbf{X}} \quad (2.24)$$

avulla seuraavasti:

$$\begin{aligned} F &= \sum_{i=1}^n \tilde{\mathbf{x}}_i^\top \mathbf{A}^\top \tilde{\mathbf{y}}_i = \text{tr} \sum_{i=1}^n \mathbf{A}^\top \tilde{\mathbf{y}}_i \tilde{\mathbf{x}}_i^\top \\ &= \text{tr} \mathbf{A}^\top \sum_{i=1}^n \tilde{\mathbf{y}}_i \tilde{\mathbf{x}}_i^\top = \text{tr} \mathbf{A}^\top \mathbf{H}. \end{aligned}$$

Muodostetaan matriisin \mathbf{H} singulaariarvohajotelma. Tällöin voidaan kirjoittaa

$$\mathbf{H} = \mathbf{U} \mathbf{\Lambda} \mathbf{V}^\top, \quad (2.25)$$

missä matriisit \mathbf{U} ja \mathbf{V} ovat 3×3 -kokoisia ortogonaalimatriiseja ja matriisi $\mathbf{\Lambda}$ on 3×3 -kokoinen diagonaalimatriisi joka sisältää matriisin \mathbf{H} ominaisarvot.

Lähteessä [16] on todistettu, että matriisi

$$\mathbf{A}^\top = \mathbf{V} \mathbf{U}^\top \quad (2.26)$$

maksimoi termin F ja siten minimoi funktion $\Sigma_{\mathbf{X}, \tilde{\mathbf{Y}} \mathbf{A}}^2$. Koska matriisit \mathbf{V} ja \mathbf{U} ovat ortogonaalisia, on myös niiden tulo \mathbf{A} ortogonaalinen.

2.2.3 Moniulotteisen skaalauksen tuloskoordinaattien muuntaminen

Moniulotteisen skaalauksen tuloskoordinaateille on usein tarpeen suorittaa muunnosoperaatioita, sillä tuloskoordinaatit ovat mielivaltaisessa rotaatiossa ja iteratiivisia moniulotteisen skaalauksen menetelmiä käytettäessä ne voivat olla myös peilautuneet jonkin tai joidenkin tasojen suhteen. Lisäksi tuloskoordinaatit on aina keskitetty origon ympärille, jolloin ne tulee usein myös siirtää. Jos moniulotteisessa skaalauksessa aineiston alkioden väliset erilaisuudet eivät suuruusluokaltaan vastaa alkioden hypoteettisten koordinaattien välisiä etäisyyksiä, joudutaan tuloskoordinaatteja myös skaalaamaan, jotta koordinaattipisteiden väliset etäisyydet vastaisivat haluttua suuruusluokkaa.

Moniulotteisen skaalauksen onnistumista voidaan tarkastella visuaalisesti, jos lähtökoordinaatit tunnetaan ainakin osittain. Tällöin tuloksen oikeellisuuden tarkastelu onnistuu helpommin, jos tuloskoordinaatit on muunnettu oikeaan asentoon.

Sovelluksessa, johon moniulotteista skaalausta tässä työssä sovelletaan, tuloskoordinaattien toivotaan olevan kuvaus käyttäjän sijainneista kolmiulotteisessa euklidisessa avaruudessa. Eräs mahdollinen todellinen käyttötapaus voisi olla seuraava-

vanlainen: käyttäjä siirtyy ulkoa sisälle tallentaen samalla WLAN-signaalinvoimakkuusskannauksia tasaisin väliajoin. Käyttäjän ollessa ulkona tiedossa on signaalinvoimakkuusskannausten lisäksi mittapisteiden GNSS-koordinaatit. Moniulotteinen skaalaus suoritetaan pienelle joukolle mittauksia, joista osa on kerätty ulkoa ja osa sisältä. Tunnettujen GNSS-koordinaattien avulla selvitetään niitä vastaavien tuloskoordinaattien muunnosparametrit. Käyttäen näitä muunnosparametreja koko mittauspistejoukolle, saadaan ne muunnettua vastaamaan mahdollisimman hyvin todellisia koordinaatteja tuloskoordinaattien keskinäisen muodon säilyessä. Kun käyttäjä mittaa lisää skannauksia, voidaan osaa edellisten mittauksien estimoiduista koordinaateista käyttää verrokkina uusille mittauksille.

Tässä työssä käyttötapaus on yksinkertaisempi. Moniulotteista skaalausta sovelletaan simuloituun aineistoon, jolloin mittapisteiden alkuperäiset koordinaatit, eli hypoteettiset koordinaatit \mathbf{X} tunnetaan. Tällöin menetelmän onnistumista voidaan suoraan arvioida vertaamalla moniulotteisen skaalauksen tuloskoordinaateista $\tilde{\mathbf{Y}}$ muunnettuja koordinaatteja \mathbf{Y} todellisiin koordinaatteihin \mathbf{X} .

Yritetään löytää optimaaliset matriisit \mathbf{P} , \mathbf{R} ja \mathbf{T} sekä skaalausvakio s , jolla matriisien \mathbf{X} ja

$$\mathbf{Y} = s\tilde{\mathbf{Y}}\mathbf{P}\mathbf{R} + \mathbf{T} \quad (2.27)$$

välinen virhe

$$\Sigma_{\mathbf{X},\mathbf{Y}}^2 = \|\mathbf{X} - \mathbf{Y}\|^2 = \sum_{i=1}^n \|\mathbf{x}_i - \mathbf{y}_i\|^2$$

minimoituu.

Lasketaan matriisiin \mathbf{X} keskitys $\tilde{\mathbf{X}}$ kaavalla (2.4). Huomataan, että jos keskitetystä koordinaattimatriisista halutaan päästä takaisin alkuperäiseen koordinaattimatriisiin, onnistuu se lisäämällä keskitettyyn koordinaattimatriisiin $\tilde{\mathbf{X}}$ kaavan (2.5) mukainen termi $\mathbf{1}_n\bar{\mathbf{x}}^\top$. Tämän on tällöin oltava samalla toivottu translaatiomatriisi \mathbf{T} . Siis

$$\mathbf{T} = \mathbf{1}_n\bar{\mathbf{x}}^\top = \mathbf{1}_n \begin{bmatrix} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{x}_{i,1} & \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{x}_{i,2} & \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{x}_{i,3} \end{bmatrix}. \quad (2.28)$$

Rotaatio ja peilaus ovat riippumattomia skaalausvakiosta s kun koordinaatit ovat keskitetyt ja rotaatio suoritetaan origon suhteen [41]. Siten peilaus- ja rotaatiomatriisista yhdistetty matriisi $\mathbf{A} = \mathbf{P}\mathbf{R}$ voidaan ratkaista Prokrustes-analyysin avulla käyttäen kaavoja (2.24), (2.25) ja (2.26). Merkitään sitten keskitettyä, kierrettyä ja peilattua koordinaattimatriisia

$$\tilde{\mathbf{Y}}_{\mathbf{A}} = \tilde{\mathbf{Y}}\mathbf{A}. \quad (2.29)$$

Enää on tuntemattomana skaalausvakio s . Etsitään optimaalinen skaalausvakio mi-

nimoimalla funktio

$$\begin{aligned}\Sigma_{\tilde{\mathbf{X}}, \tilde{\mathbf{Y}}_{\mathbf{A}}}^2 &= \|\tilde{\mathbf{X}} - s\tilde{\mathbf{Y}}_{\mathbf{A}}\|^2 = \sum_{i=1}^n \|\tilde{\mathbf{x}}_i^\top - s\tilde{\mathbf{y}}_{A,i}^\top\|^2 \\ &= \sum_{i=1}^n \left(\tilde{\mathbf{x}}_i^\top \tilde{\mathbf{x}}_i + s^2 \tilde{\mathbf{y}}_{A,i}^\top \tilde{\mathbf{y}}_{A,i} - 2s \tilde{\mathbf{x}}_i^\top \tilde{\mathbf{y}}_{A,i} \right)\end{aligned}$$

muuttujan s suhteen. Tehtävä voidaan mieltää myös lineaariseksi pienimmän neliösumman ongelmaksiksi [15, s. 332]. Derivoidaan siis funktio $\Sigma_{\tilde{\mathbf{X}}, \tilde{\mathbf{Y}}_{\mathbf{A}}}^2$ muuttujan s suhteen ja merkitään se nolllaksi:

$$\begin{aligned}D_s \Sigma_{\tilde{\mathbf{X}}, \tilde{\mathbf{Y}}_{\mathbf{A}}}^2 &= 2s \sum_{i=1}^n \tilde{\mathbf{y}}_{A,i}^\top \tilde{\mathbf{y}}_{A,i} - 2 \sum_{i=1}^n \tilde{\mathbf{x}}_i^\top \tilde{\mathbf{y}}_{A,i} \\ &= 2s \operatorname{tr} \tilde{\mathbf{Y}}_{\mathbf{A}}^\top \tilde{\mathbf{Y}}_{\mathbf{A}} - 2 \operatorname{tr} \tilde{\mathbf{X}}^\top \tilde{\mathbf{Y}}_{\mathbf{A}} = 0.\end{aligned}$$

Muuttujan s arvo derivaatan nollakohdassa minimoi funktion $\Sigma_{\tilde{\mathbf{X}}, \tilde{\mathbf{Y}}_{\mathbf{A}}}^2$, eli optimaalinen skaalausvakio on

$$s = \frac{\operatorname{tr} \tilde{\mathbf{X}}^\top \tilde{\mathbf{Y}}_{\mathbf{A}}}{\operatorname{tr} \tilde{\mathbf{Y}}_{\mathbf{A}}^\top \tilde{\mathbf{Y}}_{\mathbf{A}}}. \quad (2.30)$$

Moniulotteisen skaalauksen keskitettyjen tuloskoordinaattien $\tilde{\mathbf{Y}}$ muuntaminen mahdollisimman lähelle hypoteettisia koordinaatteja \mathbf{X} on tiivistetty algoritmiin [3]. Myös Von ym. [40] tutkimuksessa päädyttiin samankaltaiseen algoritmiin MDS-koordinaattien muuntamiseksi.

Algoritmi 3 Keskitettyjen koordinaattien muuntaminen

Input: Hypoteettiset koordinaatit $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n \times 3}$.

MDS-algoritmin tuloskoordinaatit $\tilde{\mathbf{Y}} \in \mathbb{R}^{n \times 3}$.

Output: Muunnetut koordinaatit \mathbf{Y} .

- 1: Laske translaatiomatriisi \mathbf{T} kaavalla (2.28).
 - 2: Laske keskitysmatriisi \mathbf{C} kaavalla (2.3) ja keskitä koordinaatit \mathbf{X} laskemalla $\tilde{\mathbf{X}} = \mathbf{C}\mathbf{X}$ (2.4).
 - 3: Laske matriisi \mathbf{H} kaavalla (2.24).
 - 4: Muodosta matriisin \mathbf{H} singulaariarvohajotelma $\mathbf{H} = \mathbf{U}\mathbf{\Lambda}\mathbf{V}^\top$ (2.25).
 - 5: Laske peilausmatriisin ja rotaatiomatriisin tulo $\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{V}^\top$ (2.26).
 - 6: Laske $\tilde{\mathbf{Y}}_{\mathbf{A}}$ kaavalla (2.29).
 - 7: Laske skaalausvakio s kaavalla (2.30).
 - 8: Laske muunnetut koordinaatit \mathbf{Y} kaavalla (2.27), missä $\mathbf{P}\mathbf{R} = \mathbf{A}$.
-

2.3 Bayesilainen päättely

Bayesilainen päättely perustuu ajatukseen, että tapahtuman todennäköisyyden laskemisessa otetaan huomioon havaintoaineiston informaatio, kuten mittaustulokset

tai tilasto sekä subjektiivinen ennakkotieto tapahtumasta [19]. Tässä työssä bayesilaista päättelyä sovelletaan signaalinvoimakkuuskannausten välisten erilaisuuksien arviointiin. Tässä kappaleessa esitellään bayesilaisen päättelyn matemaattinen tausta ja kappaleessa 3.4 esitellään teorian käyttämistä sovelluksessa.

Määritelmä 2.15. *Bayesin kaava.* Tapahtuman B todennäköisyys ehdolla A voidaan Bayesin teoreeman mukaan kirjoittaa seuraavasti:

$$P(B|A) = \frac{P(A|B)P(B)}{P(A)}, \quad (2.31)$$

missä todennäköisyys $P(A|B)$ on tapahtuman A todennäköisyys ehdolla B , $P(A)$ on tapahtuman A prioritodennäköisyys ja $P(B)$ on tapahtuman B prioritodennäköisyys.

Todennäköisyyttä $P(B|A)$ kutsutaan myös posterioritodennäköisyydeksi. Bayesin kaavan avulla prioritodennäköisyys $P(B)$ voidaan päivittää posterioritodennäköisyydeksi $P(B|A)$ tapahtuman A havaitsemisen jälkeen.

Bayesin kaavasta (2.31) voidaan johtaa vastaava tulos tiheysfunktioille [33].

Määritelmä 2.16. *Bayesin kaava tiheysfunktioille.* Jatkuvalle muuttujalle x voidaan ilmaista Bayesin teoreeman mukaisesti posteriorijakauma

$$p(x|y) = \frac{p(y|x)p(x)}{p(y)}, \quad (2.32)$$

missä $p(y|x)$ on aineiston ehdollinen tiheysfunktio, joka on muuttujan x funktiona verrannollinen sen uskottavuusfunktioon. Funktio $p(x)$ on satunnaismuuttujan x priorijakauma eli käsitys muuttujan x todennäköisyydestä ennen kuin aineisto y on tiedossa. Funktio $p(y)$ on aineiston y reunajakauman tiheysfunktio.

Jatkuvalle avaruudelle parametri $p(y)$ voidaan laskea integraalina

$$p(y) = \int p(y|x)p(x)dx.$$

Tämä aineiston reunatodennäköisyys $p(y)$ käyttäytyy Bayesin teoreeman kaavassa (2.32) normalisoivana vakiona, joka tekee osoittajasta $p(y|x)p(x)$ tiheysfunktion. Bayesin kaava todennäköisyysjakaumille voidaan lausua

$$\text{Posteriori} \propto \text{Uskottavuus} \times \text{Priori},$$

missä symboli \propto merkitsee verrannollisuutta.

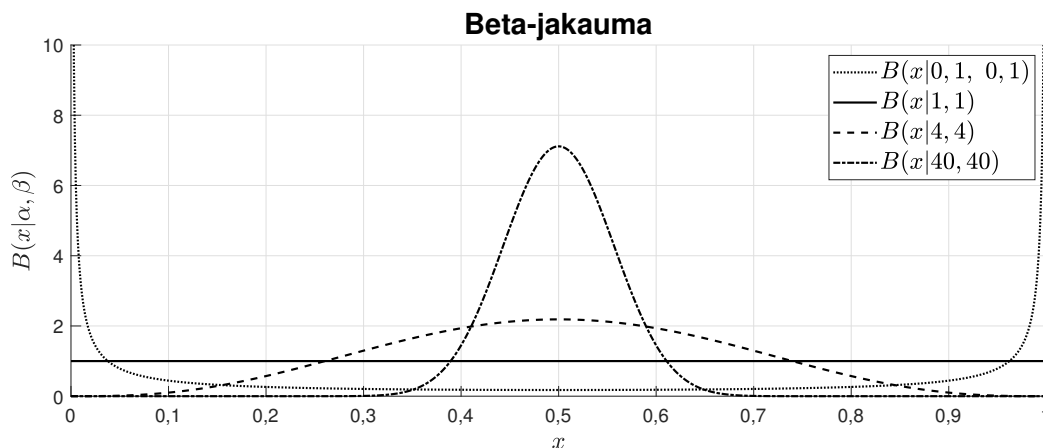
Priorijakauman $p(x)$ käyttäminen todennäköisyyden arvioimiseen erottaa bayesilaisen analyysin klassisesta tilastollisesta analyysistä. Sopiva priorijakauma tuntemattomalle osuudelle x voi olla esimerkiksi jokin Beta-jakauma [26, 33].

Määritelmä 2.17. *Beta-jakauma.* Olkoon parametrit α ja β positiivisia reaalilukuja. Parametri x saa arvoja väliltä $[0,1]$. Beta-jakauman tiheysfunktio on

$$B(x|\alpha, \beta) = \frac{\Gamma(\alpha + \beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} x^{\alpha-1} (1-x)^{\beta-1},$$

missä gammafunktio $\Gamma(a) = \int_0^\infty y^{a-1} e^{-y} dy$, kun muuttuja a on positiivinen. Gammafunktio yksinkertaistuu muotoon $\Gamma(a) = (a-1)!$, kun a on positiivinen kokonaisluku.

Jos parametrissa x on vain hyvin vähän etukäteisinformaatiota, voidaan parametrit α ja β valita niin, että Beta-jakaumasta tulee vakio. Tällöin prioria kutsutaan epäinformatiiviseksi. Vakio prior ei toisaalta vaikuta posterioriin ollenkaan ja toisaalta se vaikuttaa paljon, jos sitä verrataan johonkin toiseen prioriin. Jos puolestaan parametrissa x on paljon merkittävää prioritietoa, voidaan parametrien α ja β arvoiksi valita suuria arvoja, jolloin jakauman varianssi pienenee ja priorin informaatio vaikuttaa merkittävämmiin posteriorijakaumaan. Tällöin prior on informatiivinen. Jos halutaan, että prioritieto vaikuttaa posterioriin kohtuullisesti, voidaan parametrien α ja β arvot valita niin, että Beta-jakauman keskiarvo on ennakkotiedon mukainen, mutta varianssi suurempi.



Kuva 3 Parametrien α ja β vaikutus Beta-jakaumaan

Kuvaan [3] on piirretty Beta-jakaumat muutamalla muuttujien α ja β arvoilla. Jakaumalla $B(x|1,1)$ prior on epäinformatiivinen. Kuvasta voidaan havaita varianssin pieneneminen kun valitaan suuria arvoja parametreille α ja β .

2.4 Ydinestimointi

Ydinestimointi on menetelmä, jonka avulla diskreetistä tilastosta voidaan muodostaa todennäköisyystiheysfunktio. Tämän työn sovelluksessa ydinestimointia käytetään yhdessä bayesilaisen päättelyn kanssa. Tilastosta, johon on koottu mittapisteiden välisiä etäisyyksiä ja niitä vastaavia signaalinvoimakkuuspareja, muodostetaan ydinestimoinnin avulla todennäköisyystiheysfunktioita. Näitä funktioita käytetään bayesilaisen päättelyn apuna estimoimaan signaalinvoimakkuusmittausten välisiä etäisyyksiä.

Histogrammi on vanhin ja laajimmin käytetty tiheysestimaattori [38], joka kertoo luokan alkioden esiintymistiheyden aineistossa.

Määritelmä 2.18. [38] Olkoon X näyteavaruus, $x_i \in X$ ja n otoskoko. Kukin x_i kuuluu johonkin luokkaan. Parametrilla l merkitään luokan leveyttä. Histogrammi voidaan määritellä

$$f(x) = \frac{C(x_i, x)}{nl},$$

missä $C(x_i, x)$ on niiden alkioden x_i lukumäärä, jotka ovat samassa luokassa muutujan x kanssa.

Luokkien keskipisteen valinnalla on suuri vaikutus histogrammiin. Histogrammin sileyttä kontrolloi luokan leveys l .

Jos aineistosta halutaan muodostaa histogrammia yleisempi todennäköisyystiheysfunktio, voidaan käyttää ydinestimaatiota, jolloin histogrammiin ikään kuin sovitaan todennäköisyystiheysfunktio. Tällaisen todennäköisyystiheysfunktion etuna on myös sen derivoituvuus [37, s. 144].

Kuvassa 4 on esimerkki histogrammista, jossa vierekkäisten luokkien alkioden lukumäärillä on suuria eroja. Ydinestimaatilla on tällöin merkittävä rooli todennäköisyystiheyksien tasoittajana. Esimerkin histogrammi on skaalattu kuvaan siten, että histogrammin kattama pinta-ala on 1.

Ydinestimaation muodostamisessa ajatuksena on, että jokaisen näytteen kohdalle laitetaan ytimeksi kutsuttu todennäköisyystiheysfunktio. Ydinestimaattori on näiden ytimien summa.

Määritelmä 2.19. Funktio $K(u)$ on kernelfunktio eli *ydinfunktio*, jolle pätee

$$\int_{-\infty}^{\infty} K(u) du = 1.$$

Määritelmä 2.20. Olkoon aineisto X ja n on aineiston alkioden x_i lukumäärä. Aineiston ydinestimäätori [38] on funktio

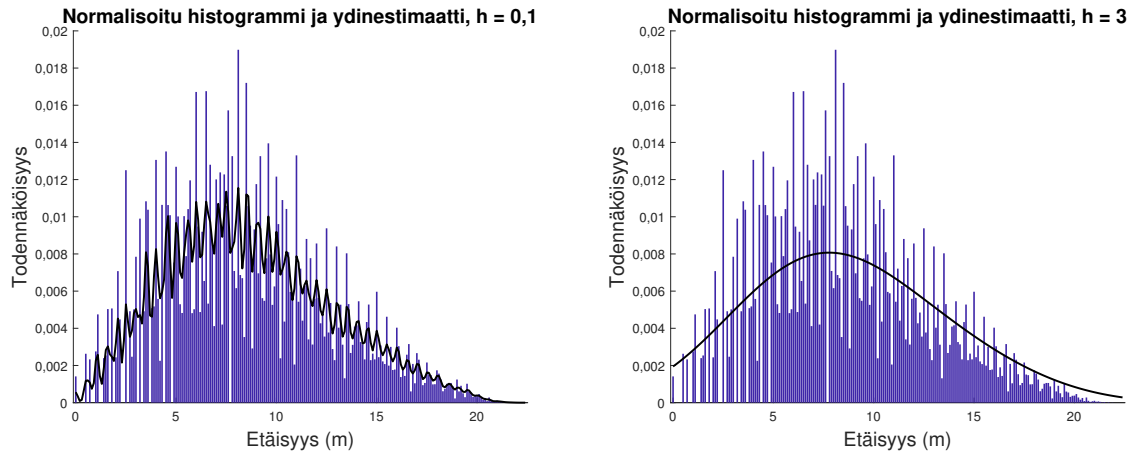
$$\hat{f}(x) = \frac{1}{nh} \sum_{i=1}^n K\left(\frac{x - x_i}{h}\right),$$

missä vakio h on tasoitusparametri ja funktio $K(u)$ ydin.

Ydin on usein, muttei aina [38], symmetrinen todennäköisyystiheysfunktio. Esimerkiksi normaalijakauma on laajalti käytetty ydin [27, 37, 38]. Gaussinen ydin on siten

$$K(u) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}u^2}.$$

Ytimen valinta vaikuttaa ydinestimäätorin laatuun, mutta suurempi vaikutus on tasoitusparametrilla h [37], jonka vaikutuksia on esitelty kuvassa 4.



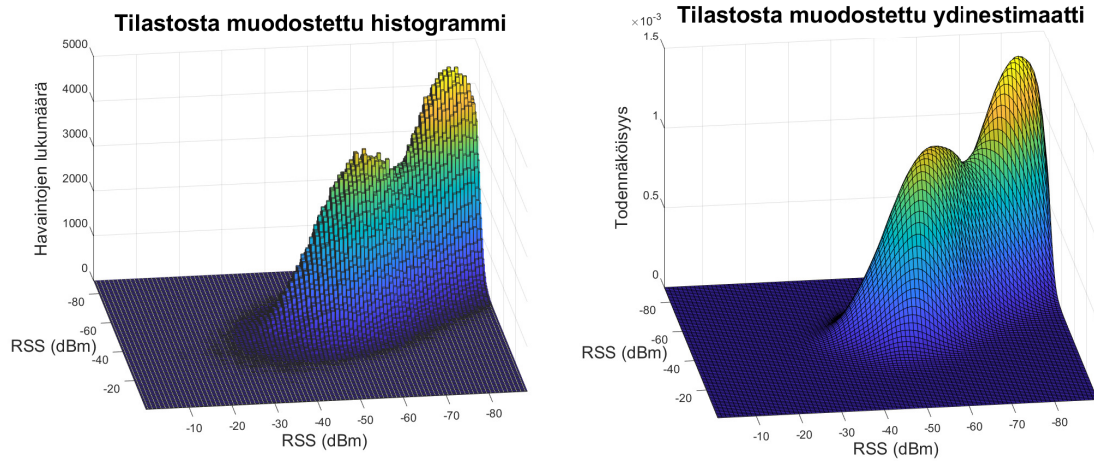
Kuva 4 Tasoitusparametrin h vaikutus ydinestimäättiin. Kun tasoitusparametri kasvaa, ydinestimäätti loivenee. Kuvassa histogrammi on skaalattu y -suunnassa niin, että sen kattama pinta-ala on 1. Histogrammin luokan leveys l on 0,1 metriä ja otoskoko 119000.

Määritelmän [2.20] kaava sopii yksiulotteiselle aineistolle. Ydinestimäätori voidaan kuitenkin yleistää m -ulotteiselle aineistolle [27, 37, s. 161–164].

Määritelmä 2.21. Olkoon aineiston \mathbf{X} alkiot m -ulotteisia vektoreita \mathbf{x}_i , ja olkoon niiden lukumäärä n . Tällöin aineiston ydinestimäätori [37, s. 162] on

$$\hat{f}(\mathbf{x}) = \frac{1}{nh_1 \dots h_m} \sum_{i=1}^n \left(\prod_{j=1}^m K\left(\frac{x_j - x_{ij}}{h_j}\right) \right),$$

missä parametri h_j on dimension j tasoitusparametri.



Kuva 5 Kuvassa vasemmalla on kaksiulotteisesta aineistosta muodostettu histogrammi, jossa korkeus ja väri kuvaavat havaintojen lukumäärää. Havaintojen kokonaismäärä on 3091000. Oikealla on samasta aineistosta muodostettu kaksiulotteinen ydineestimaatti, jossa korkeus ja väri kuvaavat pisteparin todennäköisyyttä.

Kuvassa 5 on esimerkki kaksiulotteisesta aineistosta muodostetusta histogrammista ja ydineestimaatista. Esimerkissä tasoituserroin oli sama jokaista akselia kohden.

3. SOVELLUS

Langattoman lähiverkon (WLAN) tukiasemia on monissa paikoissa, kuten kotona, työpaikoilla, kouluissa, kauppakeskuksissa ja lentokentillä. Ne mahdollistavat tietokoneiden pääsyn lähiverkkoon. Langatonta lähiverkkoa ei ole suunniteltu paikannuskäyttöön, mutta hyödyntämällä WLAN-tukiasemien lähettämiä signaaleja ja erityisesti mittaamalla signaalien voimakkuuksia (RSS, Received Signal Strength) voidaan langatonta lähiverkkoa hyödyntää paikannuksessa [22]. RSS-skannaus on joukko signaalinvoimakkuuksia, joille kullekin on identifioitu yksikäsitteinen signaalin lähde eli MAC-osoite. Yksi tukiasema voi lähettää signaaleja useammasta kuin yhdestä MAC-osoitteesta.

Tässä työssä pyritään vastaamaan seuraavaan kysymykseen: *Jos annetaan joukko WLAN-signaalinvoimakkuusskannauksia eikä mitään muuta informaatiota, voidaanko niille löytää koordinaattiesitys, joka vastaa skannauksiin liittyviä sijainteja reaali maailmassa?* Ongelmaa lähdetään testaamaan kolmiosaisella menettelytavalla:

- 1) *Etäisyyksien arviointi.* Mittapisteiden väliset etäisyydet arvioidaan RSS-skannausten erojen perusteella käyttäen bayesilaista päättelyä (kappaleet 2.3 ja 3.4).
- 2) *Koordinaattien laskeminen.* Moniulotteisen skaalauksen algoritmina käytetään sekä klassista (algoritmi 1) että iteratiivista (algoritmi 2) menetelmää mittapisteiden koordinaattien laskemiseksi arvioitujen etäisyyksien perusteella.
- 3) *Koordinaattien muuntaminen.* Prokrustes-analyysia ja algoritmia 3 käytetään muuntamaan koordinaatit haluttuun koordinaatistoon.

Vaiheen 3 jälkeen voidaan numeerisin menetelmin analysoida kuinka hyvin koordinaatit vastaavat mittapisteiden todellisia sijainteja. Tuloksia voidaan analysoida myös visuaalisin keinoin, jolloin myös tutkimuskysymykseen voidaan tuottaa subjektiivinen vastaus.

Samaa kolmivaiheista menettelytapaa mittapisteiden sijaintien estimoimiseksi käytettiin Chaurasiyan ym. [10] ja Von ym. [40] tutkimuksissa. Suurimpana erona molempiin mainittuihin tutkimuksiin on etäisyyden estimoinnin menetelmä. Edellä

mainituissa tutkimuksissa joidenkin tukiasemien sijainti tiedettiin tarkasti ja puuttuvat etäisyydet estimoitiiin suoraan solmujen välisistä RSS-mittauksista. Tässä tutkimuksessa oletetaan, että mitään informaatiota tukiasemien sijainneista ei ole. Koska solmut ovat tässä tutkimuksessa oletuksen nojalla mittapisteitä eikä tukiasemia, ei niiden välisiä etäisyyksiä voida arvioida toisen mittapisteen lähettämästä signaalista, sillä mittapisteet itsessään eivät ole signaalin lähteitä. Siksi etäisyysarvioinnin täytyy perustua pelkästään RSS-skannausten erojen mittaamiseen eikä signaalinvaihemismallin avulla estimoituun tukiaseman ja mittapisteen väliseen etäisyyteen.

Aiemmissa moniulotteista skaalausta koskevissa tutkimuksissa on huomattu, että paremman lopputuloksen toivossa suuri aineisto kannattaa ensin klusteroida pienempiin osiin ennen moniulotteisen skaalauksen suorittamista [21]. Tässä tutkimuksessa ei oteta kantaa klusterointimenetelmiin, vaan oletetaan, että aineisto on valmiiksi klusteroitu sopivan pieniin kokonaisuuksiin.

Tässä luvussa taustoitetaan tutkimusongelmaa ja sen lähtökohtia. Lisäksi esitellään joitain matemaattisia apuvälineitä ongelman ratkaisun tueksi. Aluksi esitellään sisätilapaikannuksen menetelmiä yleisesti. Tämän jälkeen keskitytään kirjallisuudesta löytyviin esimerkkeihin, joissa WLAN-sisätilapaikannuksen ongelmien ratkaisemiseksi on hyödynnetty moniulotteista skaalausta. Kirjallisuuskatsauksen jälkeen esitellään matemaattisia apuvälineitä, joiden avulla pyritään ratkaisemaan tutkimusongelma. Luvussa [4] analysointimenetelmiä testataan simuloitulla aineistolla. Sitä varten kappaleessa [3.3] esitellään signaalin vaimenemismalli, jonka avulla signaalinvoimakkuusmittauksia simuloidaan. Signaalin vaimenemismallin avulla muodostetusta simulaatiosta kerätään tilastoja RSS-skannausten erojen yhteydestä mittapisteiden väliseen fyysiseen etäisyyteen. Etäisyysestimoinnin yksityiskohdista kerrotaan kappaleessa [3.4].

3.1 Sisätilapaikannus

Paikannuksella tarkoitetaan prosessia, jossa objektille etsitään paikkatieto sovitussa koordinaattijärjestelmässä [10]. Paikannusteknologia on tärkeässä roolissa modernissa kommunikaatioteknologiassa. Kaupallisten sovellusten lisääntyessä myös sisätilapaikannuspalveluiden tarve kasvaa [22]. Maailmanlaajuinen satelliittipaikannusjärjestelmä (GNSS, Global Navigation Satellite System) on yleisesti käytössä oleva paikannusteknologia, joka perustuu satelliittien lähettämiin paikka- ja aikatietoihin [25]. GNSS-teknologia ei kuitenkaan sovellu paikantamiseen sisätiloissa, sillä läpäistessään seinä- ja kattorakenteita signaalit heikkenevät merkittävästi [22]. Tämän lisäksi toimiakseen tarkasti GNSS-teknikka vaatii suoran näköyhteyden mittalaitteen ja satelliitin välillä [22, 25].

Useat langattomat paikannusteknologiat perustuvat signaalin fyysisille ominaisuuksille tai sen ajan mittaamiselle, mikä signaalilta kestää kulkea lähettäjältä vastaanottajalle [5, 8]. Langattomat paikannustekniikat voidaan jakaa välimatkamittauksiin perustuviin teknologioihin ja teknologioihin, jotka eivät hyödynnä suoria välimatkamittauksia paikannettavan kohteen ja tunnetun sijainnin välillä [20, 10, 12, 39, 40]. Välimatkamittauksiin perustuvat metodit perustuvat oletukseen, että signaalin lähettäjän ja vastaanottajan välinen absoluuttinen etäisyys voidaan estimoida kun taas muut metodit pyrkivät arvioimaan etäisyyden muilla keinoin. [20, 40]

Saapumisaikaan (TOA, Time of Arrival) perustuvat järjestelmät mittaavat aikaa, joka signaalilta kuluu kulkea mittalaitteen ja tunnetun sijainnin välillä, minkä perusteella voidaan laskea niiden välinen etäisyys. Saapumisaikaeroon (TDOA, Time Difference of Arrival) perustuva metodi on samankaltainen, mutta se hyödyntää saapumisaikojen eroja [5]. Myös osa vastaanotetun signaalin voimakkuuteen perustuvista paikannusjärjestelmistä arvioi etäisyyttä lähettimeen, jonka sijainti tunnetaan [8]. Edellä kuvatut metodit perustuvat paikannettavan objektin ja tunnetun sijainnin välisiin etäisyysmittauksiin, joista esimerkiksi trilateraation tai multilateraation avulla lasketaan objektin sijainti [20].

Sisätiloissa tapahtuvalle langattomalle paikannukselle on kehitetty lukuisia eri teknologioita, jotka hyödyntävät edellä kuvattuja metodeita paikan estimointiin. Tekniikoita ovat muun muassa tavallisiin tai infrapunakameroihin perustuvat paikannusysteemit, jolloin voidaan esimerkiksi useiden kameroiden kuvaamien kuvien perusteella laskea kuvattavan kohteen sijainti suhteessa kameroihin, joiden tarkat suhteelliset sijainnit tunnetaan. Toinen esimerkki on UWB-teknologia (Ultra-WideBand), jossa huoneeseen sijoitetaan ankkureita, joiden paikat tiedetään. Ankkurit lähettävät radioimpulsseja paikannettaville objekteille, jotka laskevat etäisyyden ankkureihin käyttäen TOA- tai TDOA-menetelmiä [43]. Myös aikamittauksiin perustuvaa WLAN-paikannusteknologiaa on kehitetty, mutta sitä ei voida vielä hyödyntää laajassa mittakaavassa nykyisin käytössä olevalla WLAN-kalustolla [2].

Fingerprinting-menetelmä on esimerkki paikannusteknologiasta, joka ei hyödynnä suoria välimatkamittauksia. Fingerprinting on radiosormenjälkiin perustuva teknologia, jota käytetään laajalti WLAN-sisätilapaikannuksessa [22, 6]. Sen sijaan, että arvioitaisiin etäisyyksiä tunnettuihin tukiasemiin, fingerprinting-menetelmässä sijainti estimoidaan vertailemalla mitattuja RSS-arvoja radiokarttaan, joka koostuu etukäteen kerätyistä RSS-skannauksista tunnetuissa sijainneissa [22]. Fingerprinting-menetelmällä voidaan päästä 2–3 metrin paikannustarkkuuteen, jos radiokartta kattaa paikannettavan alueen riittävän tarkasti [6]. RSS-mittauksiin perustuvien paikannusalgoritmien haasteena on se, että WLAN-signaalien kulkuun vaikuttavat mer-

kittävästi huoneen rakenteen, seinien ja huonekalujen materiaalit sekä satunnaisten objektien, kuten ihmisten, aiheuttama häiriö [6, 5]. Fingerprinting-menetelmän heikkoutena on siten radiokartan muodostamisen ja ylläpitämisen työläys ja RSS-skannausten alttius häiriöille [22].

3.2 MDS-algoritmien käyttö WLAN-sisätilapaikannuksessa

Seuraavaksi esitellään muutamia tutkimuksia, joissa moniulotteista skaalausta on käytetty WLAN-sisätilapaikannuksessa. WLAN-paikannukseen liittyvän verkoston komponentit ovat staattiset tukiasemat (AP, Access Point) ja liikkuvat paikannettavat objektit. Yhdessä mittapisteessä mitattua joukkoa signaalinvoimakkuuksia kutsutaan radiosormenjäljeksi (FP, FingerPrint). Sekä tukiasemat että mitatut radiosormenjäljet ovat verkoston solmukohtia. Solmut, joiden sijainti tiedetään, ovat ankurisolmuja.

Chaurasiya ym. [10] käyttivät klassista MDS-algoritmia paikantamaan verkon staattisia solmuja. Osa solmuista oli toisiinsa kytkeytyneitä ja niille saatiin arvioitua etäisyys RSS-mittauksiin perustuen, joskin yksityiskohdat etäisyysestimaatin laskennasta sivuutettiin. Ongelma, joka tässä tutkimuksessa pyrittiin ratkaisemaan, oli etäisyyden arviointi sellaisten solmujen välillä, jotka eivät ole suoraan yhteydessä toisiinsa. Paikannus tapahtui siten, että ensin kaikkien solmujen väliset erilaisuudet arvioitiin, minkä jälkeen ne syötettiin klassiseen MDS-algoritmiin. Klassisen algoritmin käyttö perusteltiin sillä, että arvioidut erilaisuudet vastasivat hyvin euklidisia etäisyyksiä. Lopuksi saaduille koordinaateille suoritettiin Helmertin transformaatio lokaalista globaaliin koordinaattisysteemiin, kun joidenkin solmujen sijainti tiedettiin.

Von ym. [40] tutkimuksessa lähtökohdat paikannusongelmalle olivat hyvin samankaltaiset kuin Chaurasiyan ym. tutkimuksessa. Erilaisuusmittana käytettiin TOA-tai RSS-mittauksiin perustuvaa etäisyyden estimointia ja niihin käytettiin painotettua moniulotteista skaalausta.

Myös Costan ym. [11] tutkimuksessa esitellään hajautettu painotettu moniulotteisen skaalauksen algoritmi (dWMDS, distributed Weighted MultiDimensional Scaling), jonka avulla pyritään löytämään staattisten solmujen sijainnit. Tutkimuksessa esitellyssä dWMDS-algoritmissa kukin solmu valitsee joukon naapureita, päivittää oman paikkansa minimoimalla itsensä ja naapureiden välisen virheen ja päivittää sitten tiedon muille solmuille.

Ji ym. [25] käyttää myös hajautettua metodologia yhdessä MDS-algoritmin kanssa es-

timoimaan solmujen sijainteja kun joidenkin solmujen sijainnit tiedetään. Tässäkin metodissa etäisyysestimaattina käytetään RSS-mittauksia paikannettavien solmujen ja ankkurisolmujen välillä.

Cui ym. [12] esittää muokatun versionsa moniulotteisesta skaalauksesta. Tutkimuksessa oletetaan, että ankkurisolmujen sijainnit tiedetään. Tällöin MDS-algoritmile annetaan erilaisuusmatriisi, joka sisältää sekä ankkurisolmujen välisiä tarkkoja etäisyyksiä että estimoituja etäisyyksiä ankkurisolmuista paikannettaviin solmuihin.

Chan ym. [9] tutkimuksessa ongelmaksi oli asetettu verkostot, joissa kaikkien solmukohtien välille ei voida estimoida etäisyyttä. Tutkimuksessa vertailtiin klassista moniulotteista skaalausta ja painotettua moniulotteista skaalausta (WMDS, Weighted MultiDimensional Scaling) mittapisteiden paikantamiseen, sillä jälkimmäinen mahdollistaa puuttuvat etäisyysarviot. Tutkimuksessa ei otettu kantaa siihen, miten etäisyydet mittapisteiden välillä estimoidaan, vaan ne oletettiin annetuiksi ja riittävän tarkkoiksi.

Cabero ym. [8] käyttivät dynaamista painotettua moniulotteista skaalausta (DWMDS, Dynamic Weighted MultiDimensional Scaling) käyttäjän paikan estimointiin. Siinä DWMDS-algoritmiin syötettiin tietoa kaikista verkoston solmukohtien välisistä etäisyysarvioista. Tässä tutkimuksessa solmukohtiin luettiin lukuisat liikkuvat käyttäjät sekä staattiset tukiasemat. Syötetty informaatio oli binäärinen matriisi, joka kertoi solmukohtien liitännäisyydestä. Solmut olivat liitännäiset, jos ne olivat toistensa kantavuusalueella. Tämän informaation lisäksi algoritmiin lisättiin tasoittava dynaaminen sakkotermi, joka sakotti verkoston liikkuvia solmukohtia. Myös Stojkoskan ym. [39] tutkimuksessa solmujen välisessä etäisyysestimaatin laskennassa käytettiin liitännäisyysinformaatiota.

Kirjallisuudessa moniulotteista skaalausta on siis käytetty paljon tilanteisiin, joissa erilaisuusarvoksi on pystytty muodostamaan suora etäisyysestimaatti pisteiden välille. Toisaalta tutkimuksissa [8] ja [39] MDS-algoritmile syötetty erilaisuusmatriisi muodostettiin perustuen solmujen välisiin liitännäisyyksiin. Lukuisia erilaisia räätälöityjä moniulotteisen skaalauksen algoritmeja on ehdotettu paikannusongelman ratkaisemiseksi. Mainituissa tutkimuksissa ei otettu juurikaan kantaa itse erilaisuusmatriisin muodostamiseen, joka puolestaan tässä tutkimuksessa on merkittävässä osassa tulosten onnistumisen kannalta.

3.3 Signaalin vaimenemismalli

Signaalin voimakkuuden arvoa (dBm) voidaan arvioida kaavalla

$$u = A - 10n \log_{10}(d) + w, \quad (3.1)$$

missä A ja n ovat tukiasemakohtaisia vakioita, d kuvaa euklidista etäisyyttä $\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|$ mittauspisteen \mathbf{x} ja tukiaseman \mathbf{y} välillä ja w kuvaa satunnaisvirhettä [31].

Muuttuja n kuvaa tukiaseman ja mittapisteen välisten esteiden, kuten ilman hiukasten, seinien, ovien ja lattian vaikutusta signaaliin. Tyhjiössä kerroin $n = 2$ [5, 35]. Koska kaikki esteet johtavat suurempaan kertoimen n arvoon, yleisesti epäyhtälö $n > 2$ pitää paikkansa [5]. Kuitenkin joissain ympäristöissä sisätiloissa parametri n voi olla hieman alle arvon 2 ja suurimmillaan lähellä arvoa 6 [35].

Parametri A on signaalin voimakkuus yhden metrin päästä tukiasemasta yksikössä dBm [31]. Kohinaa w voidaan mallintaa normaalijakaumalla, jolloin sille pätee $w \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$ [31]. Kohinan keskihajonta σ riippuu ympäristön ominaisuuksista. Koska kaikki esteet ympäristössä aiheuttavat heijastuksia tai estävät signaalien esteettömän kulun [22, 5], häiriö normaalissa sisätiloissa saattaa olla merkittävä [5].

Pyritään seuraavaksi arvioimaan kahden mittapisteen \mathbf{x}_1 ja \mathbf{x}_2 välisen etäisyyden suhdetta niissä mitattujen RSS-skannausten eroon, kun signaalit noudattavat signaalin vaimenemismallia. Toisin sanoen tarkoituksena on löytää funktio $f(\Delta \mathbf{u}) = \Delta \mathbf{x}$. Arviointi perustuu oletukseen, että mittapisteen \mathbf{x}_1 läheisyydessä signaalinvoimakkuus muuttuu lineaarisesti.

Samasta tukiasemasta mitattu signaalinvoimakkuusero Δu kahden eri mittapisteen \mathbf{x}_1 ja \mathbf{x}_2 välillä voidaan ilmaista

$$\Delta u = u_2 - u_1 = -10n \log_{10} \left(\frac{d_2}{d_1} \right) + w_2 - w_1.$$

Kun oletetaan virhe nolaksi ja asetetaan muuttujat n , \mathbf{x}_1 , ja \mathbf{y} vakioiksi, saadaan muodostettua funktio g toisen mittapisteen sijainnin \mathbf{x}_2 funktiona

$$\Delta u \approx -10n \log_{10} \left(\frac{d_2}{d_1} \right) = -10n \log_{10} \left(\frac{\|\mathbf{x}_2 - \mathbf{y}\|}{\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{y}\|} \right) = g(\mathbf{x}_2),$$

missä epävarmuus syntyy virheen huomiotta jättämisestä. Approksimoidaan funktiota $g(\mathbf{x}_2)$ linearisoimalla se pisteen \mathbf{x}_1 läheisyydessä [19], jolloin

$$g(\mathbf{x}_2) \approx g(\mathbf{x}_1) + g'(\mathbf{x}_1)(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1) = g'(\mathbf{x}_1)(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1), \quad (3.2)$$

sillä

$$g(\mathbf{x}_1) = -10n \log_{10} \left(\frac{\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{y}\|}{\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{y}\|} \right) = 0.$$

Yhtälössä (3.2) merkintä $g'(\mathbf{x}_1)$ tarkoittaa funktion $g(\mathbf{x}_2)$ derivaattaa kohdassa $\mathbf{x}_2 = \mathbf{x}_1$. Tämän arvon laskemiseksi derivoidaan funktio $g(\mathbf{x}_2)$ vektorin \mathbf{x}_2 suhteen.

Funktion $g(\mathbf{x}_2)$ osittaisderivaatta muuttujan x_{2i} suhteen on

$$\frac{\partial}{\partial x_{2i}} g(\mathbf{x}_2) = a'(b(\mathbf{x}_2)) \frac{\partial}{\partial x_{2i}} b(\mathbf{x}_2),$$

kun merkitään

$$\begin{cases} a(z) &= -10n \log_{10}(z) \\ b(\mathbf{x}_2) &= \frac{\|\mathbf{x}_2 - \mathbf{y}\|}{\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{y}\|} = \frac{\sqrt{\sum (x_{2i} - y_i)^2}}{d_1}. \end{cases}$$

Funktion $a(z)$ derivaatta muuttujan z suhteen ja funktion $b(\mathbf{x}_2)$ osittaisderivaatta muuttujan x_{2i} suhteen on

$$\begin{cases} a'(z) &= -\frac{10n}{z \ln(10)} \\ \frac{\partial}{\partial x_{2i}} b(\mathbf{x}_2) &= \frac{2(x_{2i} - y_i)}{2d_1 \sqrt{\sum (x_{2i} - y_i)^2}} = \frac{(x_{2i} - y_i)}{d_1 d_2}. \end{cases}$$

Siten saadaan laskettua funktion $g(\mathbf{x}_2)$ osittaisderivaatta

$$\frac{\partial}{\partial x_{2i}} g(\mathbf{x}_2) = -\frac{10n}{\frac{d_2}{d_1} \ln(10)} \frac{(x_{2i} - y_i)}{d_1 d_2} = -\frac{10n}{\|\mathbf{x}_2 - \mathbf{y}\|^2 \ln(10)} (x_{2i} - y_i).$$

Vektorimuodossa derivaatta $g'(\mathbf{x}_2)$ vektorin \mathbf{x}_2 suhteen voidaan ilmoittaa

$$g'(\mathbf{x}_2) = \left[\frac{\partial}{\partial x_{21}} g(\mathbf{x}_2) \quad \dots \quad \frac{\partial}{\partial x_{2m}} g(\mathbf{x}_2) \right] = -\frac{10n}{\|\mathbf{x}_2 - \mathbf{y}\|^2 \ln(10)} (\mathbf{x}_2 - \mathbf{y})^\top.$$

Linearisointi pisteen \mathbf{x}_1 ympäristössä on siten

$$\begin{aligned} \Delta u &\approx g'(\mathbf{x}_1)(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1) \\ &= -\frac{10n}{\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{y}\|^2 \ln(10)} (\mathbf{x}_1 - \mathbf{y})^\top \Delta \mathbf{x}, \end{aligned}$$

missä $\Delta \mathbf{x} = \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1$.

Usealle signaalinvoimakkuuserolle Δu saadaan linearisointi yleistettyä, kun merkitään $\Delta \mathbf{u} = [\Delta u_1 \quad \dots \quad \Delta u_k]^\top$, missä k on tukiasemien lukumäärä. Nyt jos oletetaan, että tukiasemat ja mittapistet sijaitsevat kolmiulotteisessa avaruudessa, vektorien

\mathbf{x} ja \mathbf{y} pituus on 3. Siten saadaan muodostettua $k \times 3$ kokoinen matriisi \mathbf{G} , jonka rivin i alkio on vektori

$$\mathbf{g}_i = -\frac{10n_i}{\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{y}_i\|^2 \ln(10)}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{y}_i)^\top.$$

Pisteen \mathbf{x}_1 ympäristössä signaalinvoimakkuusvektori $\Delta \mathbf{u}$ saadaan muotoon

$$\Delta \mathbf{u} = \mathbf{G} \Delta \mathbf{x}. \quad (3.3)$$

Jos oletetaan, että matriisin \mathbf{G} sarakevektorit ovat lineaarisesti riippumattomia, voidaan vektori $\Delta \mathbf{x}$ ratkaista käyttäen pienimmän neliösumman menetelmää [42]. Siis yhtälöä [3.3] muovaamalla

$$\begin{aligned} \mathbf{G}^\top \Delta \mathbf{u} &= \mathbf{G}^\top \mathbf{G} \Delta \mathbf{x} \\ \Leftrightarrow (\mathbf{G}^\top \mathbf{G})^{-1} \mathbf{G}^\top \Delta \mathbf{u} &= \Delta \mathbf{x}. \end{aligned}$$

Nyt pisteen \mathbf{x}_1 läheisyydessä on löydetty funktio

$$f(\Delta \mathbf{u}) \approx (\mathbf{G}^\top \mathbf{G})^{-1} \mathbf{G}^\top \Delta \mathbf{u} = \Delta \mathbf{x},$$

joka kuvaa erotusta $\Delta \mathbf{x} = \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1$ pisteen \mathbf{x}_1 läheisyydessä.

3.4 RSS-skannausten samanlaisuuden arviointi

Bayesilaista päättelyä sovelletaan tässä työssä mittapisteiden välisen etäisyyden estimointiin pisteiden välisen signaalinvoimakkuuseron avulla. Yhdessä mittapisteteessä mitataan signaalinvoimakkuusmittauksia useista eri tukiasemista ja MAC-osoitteista. Signaalinvoimakkuuksia verrataan MAC-osoitekohtaisesti.

Määritelmä 3.1. *Skannauspari* \mathbf{U} on $k \times 2$ kokoinen matriisi, jonka rivi l muodostuu pisteissä \mathbf{x}_i ja \mathbf{x}_j mitatuista signaalinvoimakkuuksista $\mathbf{u}_l^\top = [u_i \ u_j]$, jotka on identifioitu MAC-osoitteelle l . Molemmissa pisteissä kuultuja MAC-osoitteita on k kappaletta.

Bayesin kaavan avulla pyritään muodostamaan yhteys mittapisteiden \mathbf{x}_i ja \mathbf{x}_j välille euklidiselle etäisyydelle $d_{i,j}$ ja vastaavalle skannausparille $\mathbf{U}_{i,j}$. Bayesin kaava tiheysfunktioille [2.32] esitetään sovelluksen yhteydessä muodossa

$$p(d|\mathbf{U}) = \frac{p(\mathbf{U}|d)p(d)}{p(\mathbf{U})}. \quad (3.4)$$

Tällöin korkeimman uskottavuuden estimaatti $d_{i,j}^*$ pisteiden \mathbf{x}_i ja \mathbf{x}_j väliselle etäisyydelle $d_{i,j}$ on

$$d_{i,j}^* = \operatorname{argmax}_{d \in [0, d_{max}]} (p(d|\mathbf{U})) = \operatorname{argmax}_{d \in [0, d_{max}]} \left(\frac{p(\mathbf{U}|d) p(d)}{p(\mathbf{U})} \right). \quad (3.5)$$

Aineistossa, johon Bayesin kaavaa tässä työssä sovelletaan, on tilastoitu mittapisteiden väliset etäisyydet ja nivottu ne yhteen niissä mitattuihin signaalinvoimakkuuspareihin MAC-osoitteittain. Kun etäisyyden todennäköisyysjakaumat eri signaalinvoimakkuuspareille tiedetään aineiston perusteella, voidaan eri tukiasemista tulevat signaalinvoimakkuuserojakaumat kertoa keskenään, jolloin saadaan kaikkien sormenjälkiparin signaalinvoimakkuusparien yhteinen todennäköisyysjakauma. Siten saadaan

$$p(\mathbf{U}|d) = \prod_{l=1}^k p_l(\mathbf{u}_l|d), \quad (3.6)$$

missä k on MAC-osoitteiden eli signaalinvoimakkuusparien lukumäärä. Jos halutaan laskea etäisyydestimaatteja myös käyttäen eri tukiasemakategorioille muodostettuja aineistoja, yksittäiselle MAC-osoitteelle l voidaan laskea tiheysfunktio $p_l(\mathbf{u}_l|d)$ käyttäen MAC-osoitteen l kategoriaa vastaavaa aineistoa.

Kaavan [3.4](#) parametri $p(\mathbf{U})$ on määritelty jatkuvalle avaruudelle

$$p(\mathbf{U}) = \int_d p(\mathbf{U}|d) p(d) dd.$$

Kuitenkin sovelluksessa käytännön syistä tilasto on diskretoitu, jolloin normalisointivakio lasketaan käytännössä summana

$$p(\mathbf{U}) = \sum_d p(\mathbf{U}|d) p(d).$$

Etäisyyden prioriksi $p(d)$ olisi mahdollista määritellä jokin tiheysfunktio. Kuitenkin jos halutaan vain käytetyn aineiston vaikuttavan lopputulokseen, voidaan prioriksi valita vakiofunktio $p(d) = 1$, jota luvussa [4](#) käytetään etäisyyksien estimointiin. Tämä vakiopriori ei ole varsinainen tiheysfunktio, sillä sen integraali on ääretön.

4. TESTAUS

Luvuissa 2 ja 3 on esitelty matemaattisia apuvälineitä, joiden avulla WLAN-signaalinvoimakkuusskannauksille pyritään etsimään sellaiset koordinaatit, jotka vastaisivat mahdollisimman hyvin skannausten todellisia sijainteja. Eriteltyjen menetelmien soveltuvuutta tällaisten koordinaattien löytämiseen testattiin simulaatiokokeella. Aluksi WLAN-signaalinvoimakkuusmittauksia mitattiin testiympäristössä. Testiympäristönä toimivat Tampereen yliopiston Hervannan kampuksen Sähkötalon käytävät. Mittausaineisto analysoitiin ja siitä määritettiin sopivat signaalinvoimakkuusmallin parametrit. Simulaatio ja analyysi toteutettiin MATLAB-tietokoneohjelmistolla.

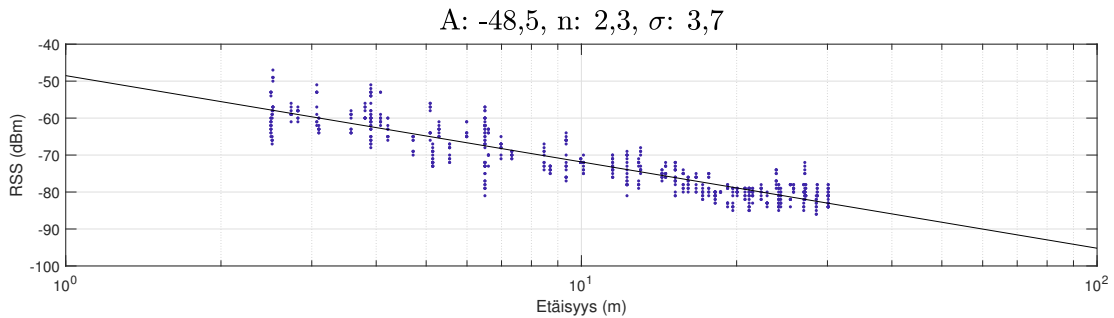
Toisessa vaiheessa kuvitteelliseen huoneeseen simuloitiin suuri määrä signaalinvoimakkuusmittauksia käyttäen edellisessä kohdassa estimoituja signaalinvaimenemismallin parametreja. Simuloidut signaalinvoimakkuudet tilastoitiin ja niistä muodostettiin bayesilaisen päättelyn vaatima aineisto.

Kolmannessa osiossa huoneeseen simuloitiin reitti, johon tasaisin välimatkoin simuloitiin kuvitteellinen mittapiste. Lisäksi huoneeseen ja sen ulkopuolelle simuloitiin tukiasemia. Jokaiseen tällaiseen reitin pisteeseen simuloitiin signaalinvoimakkuusmittauksia käyttäen jälleen hyväksi edellä määriteltyjä parametreja. Tätä vaihetta toistettiin eri tukiasemakombinaatioilla, jotta saatiin kuva analyysimetodien toimimisesta yleisellä tasolla.

Testausosion viimeisessä vaiheessa saatu simulaatioaineisto analysoitiin käyttäen hyväksi kappaleen 2 matemaattisia malleja luvussa 3 esitetyn kolmiportaisen menetelytavan mukaisesti. Simuloidun reitin mittapisteiden väliset etäisyydet arvioitiin käyttäen bayesilaista päättelyä ja hyödyntäen aiemmassa vaiheessa muodostettua simuloitua aineistoa. Saadut etäisyydet ja arviot niiden paikkansapitävyydestä syötettiin moniulotteisen skaalauksen algoritmiin, josta saatiin reitin mittapisteiden suhteelliset koordinaatit. Koordinaatit muunnettiin vastaamaan mahdollisimman hyvin reitin mittapisteitä, jonka jälkeen niiden välinen virhe arvioitiin.

4.1 Mittausaineiston kerääminen ja analysointi

Simulaatiota varten oli tarpeen määrittää signaalin vaimenemismallin parametrit A , n ja σ . Parametrit estimoitiin Tampereen yliopiston Hervannan kampuksen Sähkötalon käytävillä tehtyjen mittauksen perusteella. Mittalaite mittasi WLAN-tukiasemien lähettämien signaalien voimakkuuksia mittajaan liikkuessa tasaisella nopeudella käytävällä. Mittapisteiden eli radiosormenjälkien sijainnit estimoitiin noin metrin tarkkuudella, kun käytävien dimensiot ja mittapisteiden aikaleimat olivat tiedossa.

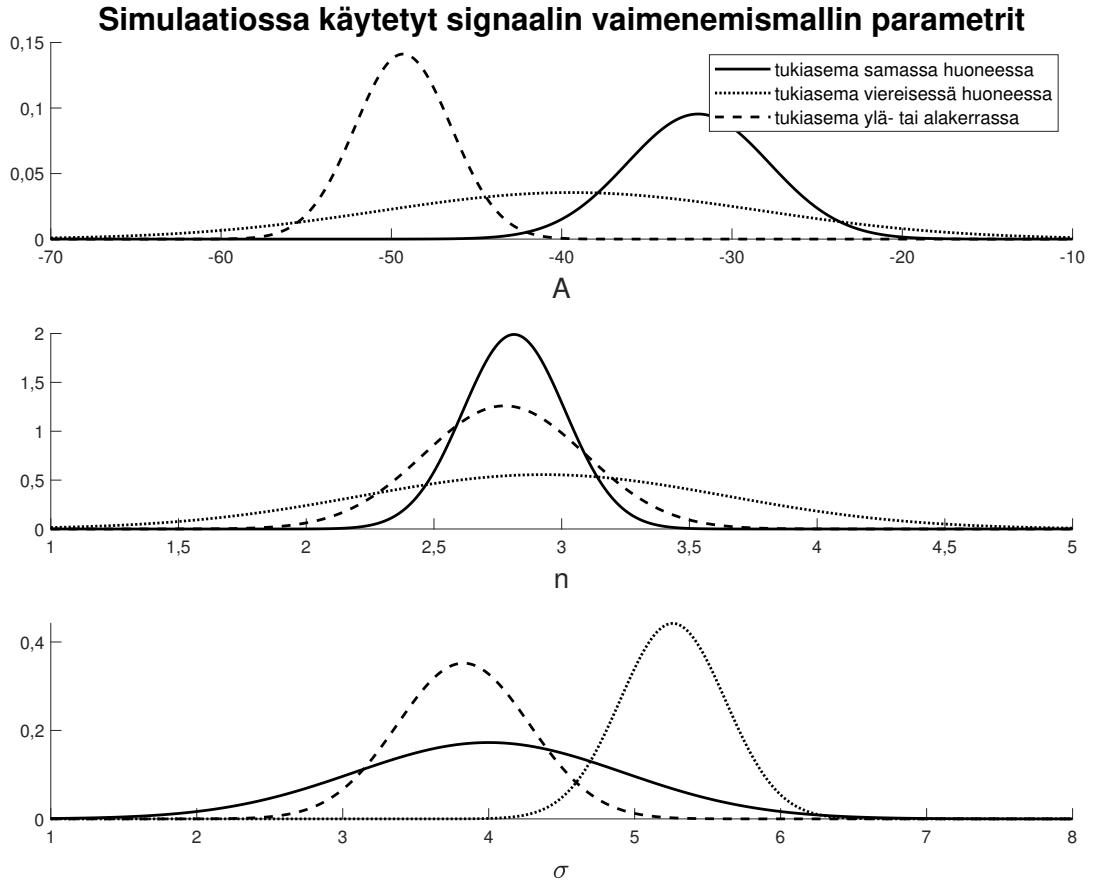


Kuva 6 Erästä tukiasemasta mitatut signaalinvoimakkuudet suhteessa arvioituun tukiaseman ja mittapisteen väliseen etäisyyteen. Parametrien A ja n etsiminen on suoran sovittamisongelma semilogaritmiseen etäisyys-signaalinvoimakkuusaineistoon.

Jokaisen mittauksissa havaitun tukiaseman sijainti mitattiin tarkasti. Mitatut signaalinvoimakkuudet kutakin tukiasemaa kohden sekä niitä vastaavat mittapisteen ja tukiaseman väliset etäisyydet taulukoitiin. Tukiasemat jaettiin eri kategorioihin riippuen niiden sijainnista mittapisteeseen nähden. Kategorioita oli kolme:

- 1) Mittapiste ja tukiasema samassa huoneessa
- 2) Tukiasema viereisessä huoneessa mittapisteeseen nähden
- 3) Tukiasema mittapisteen ylä- tai alakerrassa.

Jokaiselle kategorialle laskettiin jokaista tukiasemaa kohden mittaustuloksista estimoimalla signaalin vaimenemismallin parametrit A , n ja σ (kuva 6). Parametri A vastaa signaalinvoimakkuutta yhden metrin päässä tukiasemasta, parametri n kuvaa tilan muodon ja esteiden vaikutusta signaaliin ja parametri σ kuvaa normaalisti jakautuneen virheen keskihajontaa. Kutakin tukiasemaa kohden lasketuista parametreista laskettiin kategorioittain keskiarvo ja keskihajonta. Simulaatiossa signaalinvoimakkuusparametriksi generoitiin satunnaisluku, joka noudatti kategoriansa keskiarvon ja keskihajonnan mukaista normaalijakaumaa. Kuvassa 7 on esitelty mittausdatan pohjalta estimoitujen parametrien A , n sekä σ normaalijakaumat.



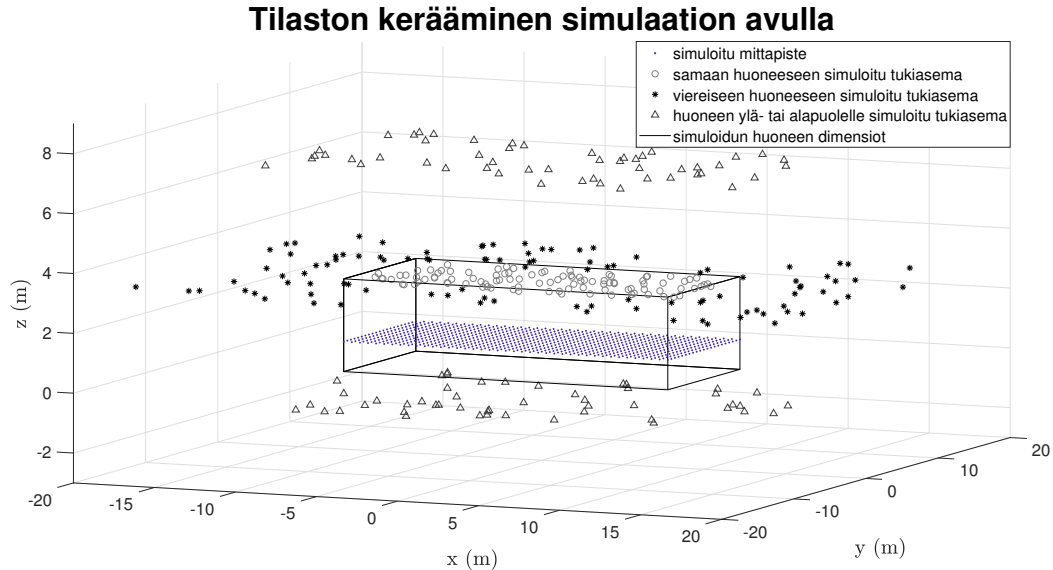
Kuva 7 Mittausten perusteella määritellyt signaalin vaimenemismallin parametrit A , n ja σ kategorioittain. Simulaatioon arvottiin kullekin tukiasemalle parametrit noudattaen mittaustuloksista estimoitujen parametrien normaalijakaumaa. Koska analyysissä käytetty etäisyyden arvio oli karkea ja mittausaineistoa kohtuullisen vähän, eivät käytetyt parametrit ole ideaaliset.

4.2 Simulaatioaineiston muodostaminen

Simulaatiototeutuksen ensimmäisessä vaiheessa pyrittiin muodostamaan aineisto, jonka perusteella voitaisiin määrittää tilastollisin menetelmin yhteys kahden mittapisteen välisestä signaalinvoimakkuuserosta mittapisteiden väliseen etäisyyteen. Aluksi huoneeseen, jonka leveys oli 10 metriä ja pituus 20 metriä, simuloitiin mittapisteitä puolen metrin välein tasolle ruudukkomuodostelmaan. Tukiasemia simuloitiin satunnaisiin paikkoihin huoneen katon tasalle yhteensä 100 kappaletta. Myös huoneen ulkopuolelle tukiasemien paikkoja simuloitiin 100 ja sekä huoneen ylä- että alapuolelle simuloitiin 50 tukiasemaa. Kuvassa [8](#) on visualisoitu käytetty virtuaalinen huone.

Kullekin mittapisteelle simuloitiin signaalinvoimakkuusarvoja kaikista simuloiduista tukiasemista signaalin vaimenemismallin [3.1](#) mukaisesti käyttäen satunnaisesti kuvassa [7](#) esitellyistä normaalijakaumista generoituja parametreja. Signaalinvoimak-

kuusarvot diskretoitiin vastaamaan kokonaislukuja. Signaalin voimakkuudet, jotka olivat alle -90 dBm, hylättiin. Jokaista mittapisteparien signaalinvoimakkuusparia kohden taulukoitiin mittapisteiden välinen euklidinen etäisyys 0,1 metrin tarkkuudella. Käytännössä taulukko oli siis kolmiulotteinen matriisi, johon tallennettiin esiintymislukumäärät kullekin signaalinvoimakkuusparille ja sitä vastaavalle etäisyydelle. Kuvassa 9 on havainnollistus muodostetusta tilastosta.

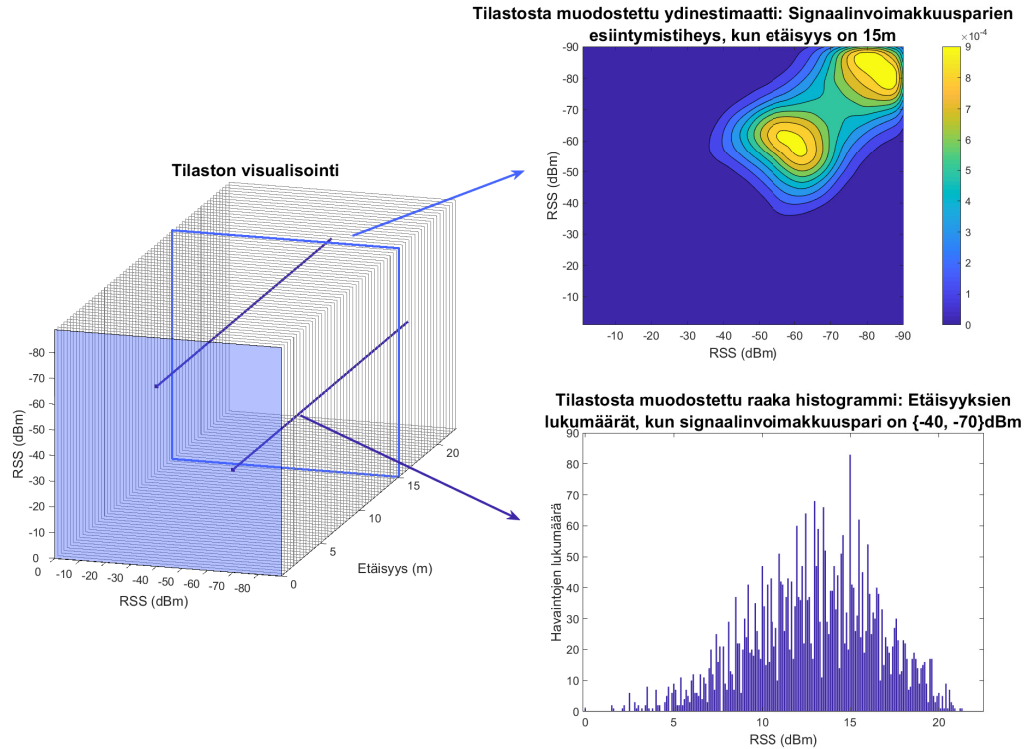


Kuva 8 Huoneeseen simuloidut mittapisteet ja tukiasemat. Simulaation avulla muodostettiin tilasto, johon koottiin kutakin mittapisteparia kohden vastaava signaalinvoimakkuuspari kustakin tukiasemasta.

Kaikille 0,1 metrin tarkkuudella oleville etäisyyksille ei ollut vastaavia signaalinvoimakkuusmittauksia mittapisteiden sijoittelusta johtuen. Väliin jääviin etäisyyksiin interpoloitiin lineaarisesti kutakin etäisyyttä vastaavasta signaalinvoimakkuusparien histogramimuodosta signaalinvoimakkuusparien esiintymismääriä. Tämän jälkeen kutakin etäisyyttä kohden muodostetusta signaalinvoimakkuusparien esiintymislukumäärästä muodostettiin ydinestimoinnin avulla kaksiulotteinen tiheysfunktio, jollaisesta näkyy esimerkki kuvassa 9.

4.3 Simulaation analysointi

Simulaation analyysivaiheessa edellä kuvattuun huoneeseen (kuva 8) muodostettiin reitti, eli joukko koordinaattipisteitä, joihin simuloitiin signaalinvoimakkuusmittauksia. Testausvaiheessa käytettiin kahta vakiokorkeudella kulkevaa reittiä, joista ensimmäinen kulkee huoneen keskellä puolelta toiselle pituussuunnassa ja toinen kulkee huoneen kulmasta kulmaan. Simuloidut mittapisteet sijoiteltiin reitille tasaisin välimatkoin.



Kuva 9 Vasemmalla on visualisointi kerätystä tilastosta. Jokaista mittapisteiden välistä etäisyyttä kohden pystytään muodostamaan tilastosta oikean yläkulman mukainen kaksiu-lotteinen tiheysfunktio käyttäen ydineestimointia. Tällainen kuva on symmetrinen eli sig-naalinvoimakkuusparin keskinäisellä järjestyksellä ei ole merkitystä. Jokaista signaalin-voimakkuusparia kohden voidaan tilastosta etsiä havainnon esiintymistiheys kullakin eri etäisyydellä. Oikeassa alakulmassa on erälle signaalivoimakkuusparille piirretty histo-grammi.

Simulaatiota testattiin erilaisilla tukiasemakombinaatioilla. Muuttujina olivat eri kategorioissa olevien tukiasemien määrä sekä MAC-osoitteiden lukumäärä tukiasemia kohden. Yhdelle tällaiselle tukiasemakombinaatiolle suoritettiin simulaatiosta 100 iteraatiota, joista puolet ensimmäiselle ja puolet toiselle reitille. Jokaisessa iteraatiossa tukiasemien sijainnit arvottiin satunnaislukugeneraattorilla ja molemmille reiteille simuloitiin RSS-mittaukset kustakin tukiasemasta ja MAC-osoitteesta. Käytetyt kombinaatiot on esitelty taulukossa [4.1](#).

Reiteille eri tukiasemakombinaatioilla simuloidut RSS-mittaukset analysoitiin yhteensä yhdeksällä eri tavalla, jotka on esitelty taulukossa [4.2](#). Muuttujana oli erilaisuuden estimointimenetelmä sekä moniulotteisen skaalauksen algoritmi. Referenssi-analyysina käytettiin analyysia A, jossa erilaisuusmittana käytettiin RSS-skannausten välistä euklidista etäisyyttä ja moniulotteinen skaalaus suoritettiin klassisena versiona. Muissa tapauksissa mittapisteiden välistä erilaisuutta arvioitiin bayesilaisittain laskemalla kullekin mittapisteparille arvioitu etäisyys kaavalla [\(3.5\)](#), missä

etäisyyden prioritodennäköisyys oli vakio eli epäinformatiivinen.

Taulukko 4.1 Tukiasemakombinaatiot. Sarakkeet 2–5 kertovat tukiasemien lukumäärän eri kategorioissa. Sarake $\frac{MAC}{AP}$ kertoo monestako eri MAC-osoitteesta signaaleja lähetetään. Sarakkeessa MAC on signaalien yhteenlaskettu lukumäärä.

Kombinaatio	Tukiasemien lukumäärä				$\frac{MAC}{AP}$	MAC
	samassa huoneessa	viereisessä huoneessa	ylä-kerrassa	ala-kerrassa		
1	1	0	0	0	4	4
2	4	0	0	0	1	4
3	4	4	2	2	5	60
4	20	20	10	10	1	60
5	8	0	0	0	10	80
6	0	4	2	2	10	80
7	50	0	0	0	1	50
8	1	0	0	0	50	50
9	0	2	1	1	1	4
10	0	2	1	1	5	20
11	1	2	1	1	1	5
12	1	2	1	1	5	25
13	10	10	5	5	1	30
14	1	5	5	5	5	80

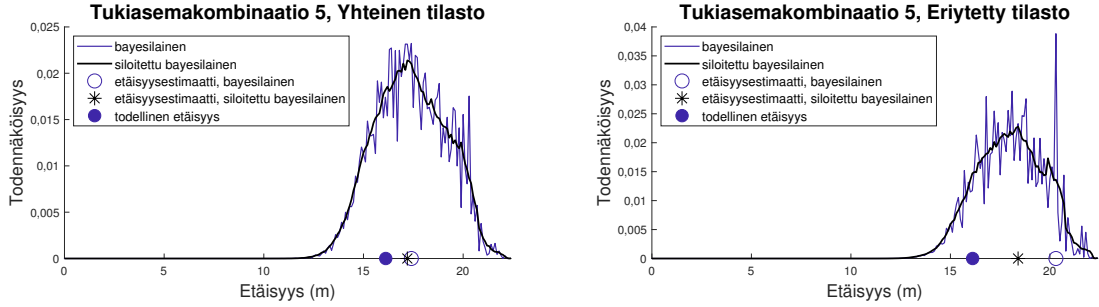
Taulukko 4.2 Analysointimenetelmät listattuna. Menetelmää A käytettiin referenssimenetelmänä. Muissa menetelmissä A-I muuttujana oli erilaisuusmitta, käytetty tilasto sekä MDS-algoritmi.

Analysointimenetelmä	Erilaisuusmitta	Tilasto	MDS-algoritmi
A	Euklidinen	-	Klassinen
B	Bayesilainen	Yhteinen	Klassinen
C	Siloitettu bayesilainen	Yhteinen	Klassinen
D	Bayesilainen	Eriytetty	Klassinen
E	Siloitettu bayesilainen	Eriytetty	Klassinen
F	Bayesilainen	Yhteinen	Painotettu
G	Siloitettu bayesilainen	Yhteinen	Painotettu
H	Bayesilainen	Eriytetty	Painotettu
I	Siloitettu bayesilainen	Eriytetty	Painotettu

Tuloksia laskiessa havaittiin, että joskus suoraan kaavalla (3.5) laskemalla tiheysfunktioon $p(d|\mathbf{U})$ tulee epätoivottua kohinaa, joka harhauttaa maksimin etsintää (kuva 10). Siksi vaihtoehdoksi laskettiin myös kullekin mittapisteparille siloitettu tiheysfunktio $p_s(d|\mathbf{U})$, jonka arvo kohdassa $d = d_i$ saadaan laskemalla kohtaa d_i lähimmän kymmenen arvon $p(d_j|\mathbf{U})$ välinen keskiarvo.

Sekä siloitettu että siloittamaton bayesilainen erilaisuuden estimointi jaettiin vielä käytetyn tilaston perusteella kahteen erilaiseen luokkaan. Tulokset laskettiin sekä

käyttäen kaikista tukiasemista yhdessä muodostettua yhteistä tilastoa että tukiasemakategorioittain eriytettyä kolmea eri tilastoa: tilastoa samassa huoneessa, viereisessä huoneessa ja huoneen ylä- tai alapuolella oleville tukiasemille. Jälkimmäisessä vaihtoehdossa todennäköisyys $p(\mathbf{u}|d)$ kaavassa (3.6) laskettiin käyttäen eri tilastoa riippuen tukiaseman sijainnista.



Kuva 10 Eräälle mittapisteparille lasketut tiheysfunktiot sekä niiden siloitettut vastineet. Kuvassa vasemmalla on käytetty yhteistä tilastoa etäisyyksien estimoimiseksi ja oikealla eri tukiasemille eri tilastoja riippuen niiden kategorioista. Oikealla oleva siloittamaton funktio aiheuttaa virhettä estimaattiin tiheysfunktion ollessa kohinainen.

Moniulotteisen skaalauksen algoritmeista käytettiin sekä klassista että painotettua iteratiivista algoritmia. Painotetussa versiossa minimoitavaksi stressifunktioksi valikoitui stressi

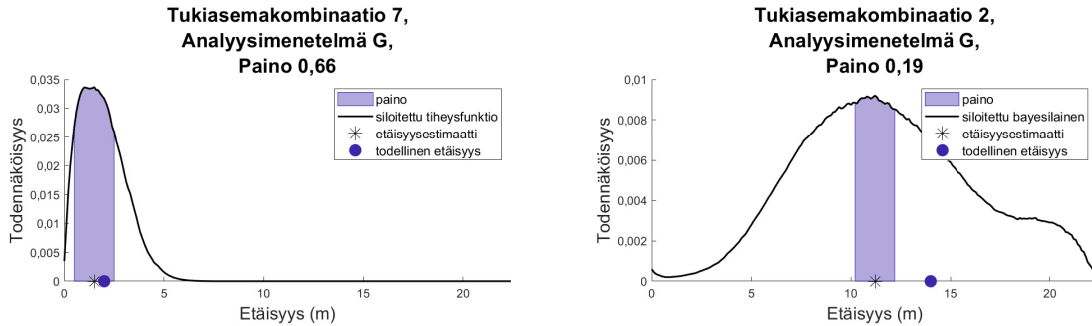
$$\sigma(\mathbf{Y}) = \sqrt{\frac{\sum_{i < j} w_{i,j} (\delta_{i,j}^2 - d_{i,j}^2(\mathbf{Y}))^2}{\sum_{i < j} w_{i,j} d_{i,j}^4(\mathbf{Y})}},$$

joka on MATLAB-ohjelmiston `mdscale`-funktiossa nimellä `sstress`. Aloituskoordinaatteina käytettiin klassisen moniulotteisen skaalauksen tulosta. Painot arvioitiin laskemalla tiheysfunktion alle jäävä pinta-ala estimoidun etäisyyden molemmiin puolin metrin alueelta. Kuvassa 11 on tästä pinta-alasta visuaalinen esitys. Tällä painon arviointimenetelmällä pyrittiin saamaan hieman pienempi paino niille etäisyysestimaateille, joiden tiheysfunktion huippu oli leveä ja siten hajonta suurempi.

Kun etäisyysestimaatit ja tarvittaessa painot oli syötetty moniulotteisen skaalauksen algoritmiin, suoritettiin tuloskoordinaateille $\tilde{\mathbf{Y}}$ koordinaattimuunnos, kuten algoritmissa 3. Lopputuloksena olivat koordinaatit \mathbf{Y} , jotka parhaiten vastasivat simuloituja koordinaatteja \mathbf{X} . Käytetyn tukiasemakombinaation ja analysointimenetelmän onnistumista mitattiin koordinaattien \mathbf{Y} ja \mathbf{X} välisellä normalisoidulla virheellä Σ^2 , joka määriteltiin

$$\Sigma^2 = \frac{\|\mathbf{X} - \mathbf{Y}\|^2}{\|\tilde{\mathbf{X}}\|^2} = \frac{\sum_{i=1}^n \|\mathbf{x}_i^\top - \mathbf{y}_i^\top\|^2}{\sum_{i=1}^n \|\tilde{\mathbf{x}}_i^\top\|^2}. \quad (4.1)$$

Virhe kuvaa sitä, kuinka hyvin estimoidut koordinaatit vastaavat alkuperäisiä koordinaatteja analyysin ja koordinaattimuunnoksen jälkeen.



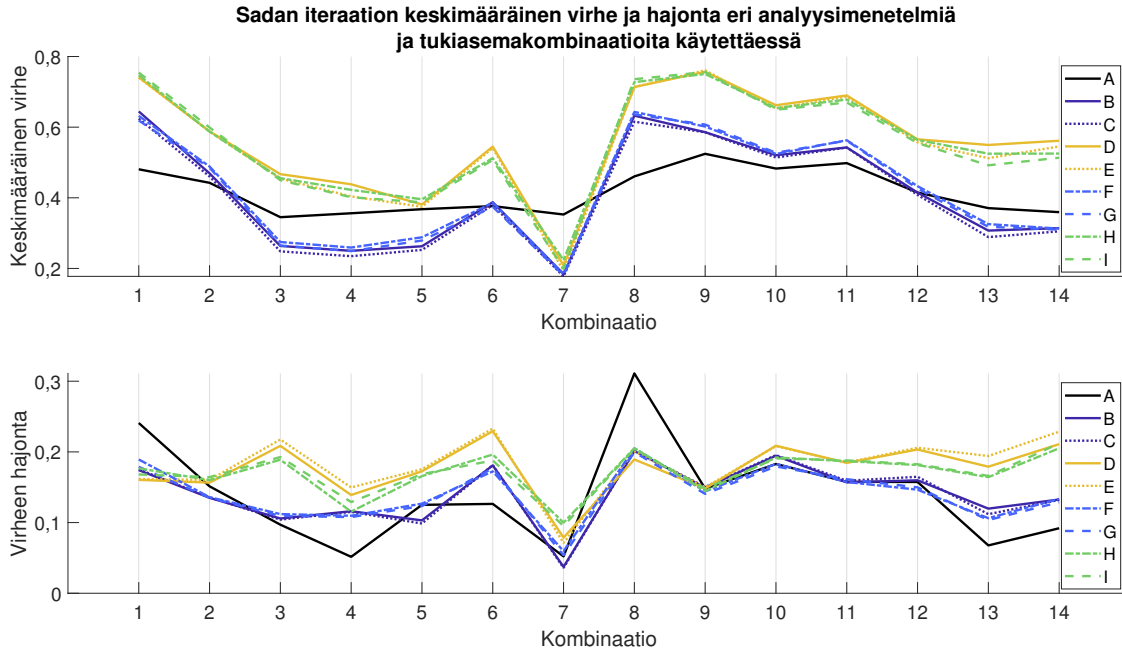
Kuva 11 Kuvassa on kahdelle eri mittapisteparille bayesilaisella päättelyllä lasketut ja siloitettuja etäisyyden tiheysfunktioita. Oikeanpuolisen kuvan huippu on kapea ja korkea ja siten sen paino on suurempi kuin vasemmanpuolisen leveän tiheysfunktion paino.

4.4 Tulokset

Kutakin tukiasemakombinaatiota ja analyysimenetelmää kohden simuloitiin sata satunnaista tilannetta, joista puolissa mittauspisteet olivat reitillä 1 ja puolissa reitillä 2. Kuvassa 12 on esitelty sadasta iteraatiosta laskettu keskimääräinen virhe ja virheen hajonta kutakin tukiasemakombinaatiota ja analyysimenetelmää kohden. Tukiasemakombinaatiot 1–14 on esitelty taulukossa 4.1 ja analyysimenetelmät A–I taulukossa 4.2. Analyysimenetelmä A oli referenssimenetelmä ja sillä keskivirhe oli tasaisin eri kombinaatioiden välillä. Muista kuin referenssimenetelmästä parhaiten suoriutuivat keskimäärin menetelmät, jossa etäisyyden estimointiin oltiin käytetty yhteistä taulukkoa, johon oli koottu kaikkien kategorioiden tukiasemat. Näiden ryhmien sisällä ei ollut juurikaan merkitystä sillä, käytettiinkö siloitettua vai siloittamatonta tiheysfunktioita estimoinnissa. Myöskään painotetulla moniulotteisella skaalauksella ei ollut merkittävää eroa klassiseen menetelmään.

Painotetun ja klassisen menetelmän erojen vähyys johtunee siitä, että ensinnäkin iteratiivisessa menetelmässä aloituskoordinaatit olivat klassisen algoritmin tuottamat koordinaatit. Toiseksi menetelmällä, jolla painot estimoititiin (kappale 4.3), ei saatu suurta hajontaa painojen välille. Tällä painonestimointimenetelmällä oli myös mahdollista, että suurimman painon saanut etäisyydestimaatti oli todellisuudessa keskimääräistä huonompi. Tällöin painotuksen käyttö heikensi algoritmin toimintaa. Tällaisesta tilanteesta on esimerkki kuvassa 15 vasemmalla. Toisaalta tutkimuksen 10 perusteella, kun pisteiden välinen arvioitu erilaisuus vastaa hyvin todellista euklidista etäisyyttä, toimii klassinen moniulotteinen skaalaus riittävän hyvin. Bayesilaisella päättelyllä estimoidut erilaisuudet vastasivatkin parhaiten menestyneiden

kombinaatioiden osalta todellisia etäisyyksiä pääasiassa hyvin.

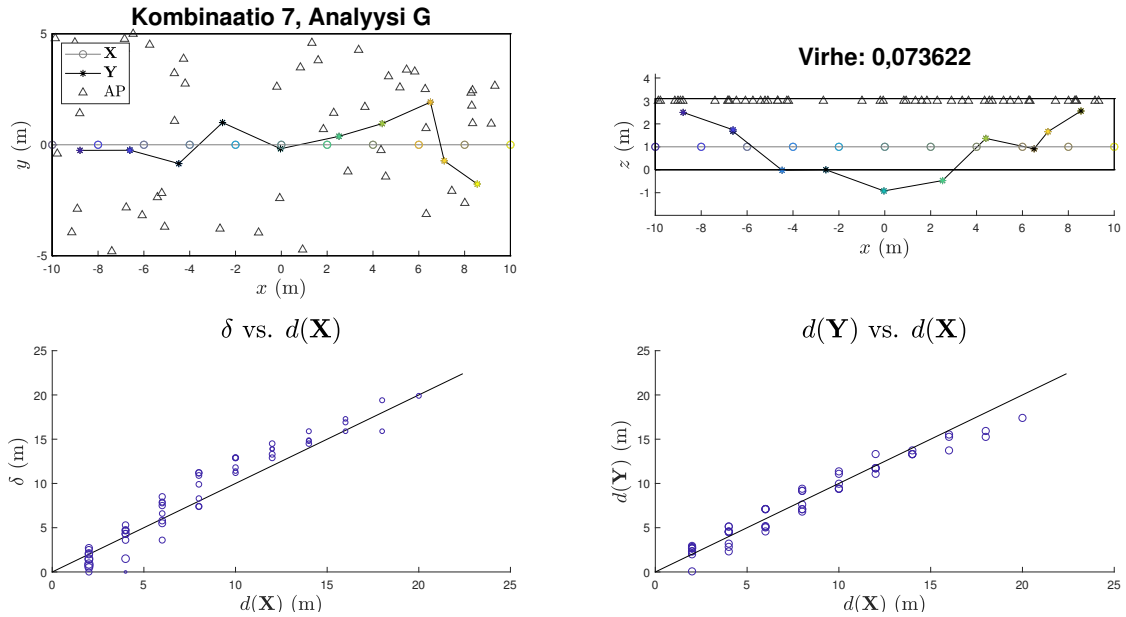


Kuva 12 Jokaiselle kombinaatiolle 1–14 (Taulukko 4.1) tehtiin 100 kertaa simulaatio ja analyysit A–I (Taulukko 4.2). Kuvassa ylhäällä on näiden analyysien keskimääräinen virhe (4.1) ja alhaalla virheen hajonta. Kombinaatio 7 osoittautui parhaimmaksi ja referenssianalyysimenetodi A tasaisimmaksi suoriutujaksi.

Kombinaatioiden välillä oli suuri ero siinä, miten hyvin bayesilainen estimointi onnistui. Kombinaatiot, joissa signaalin lähteitä oli vähiten (kombinaatiot 1, 2, 8–12), tuottivat kaikilla metodeilla eniten virhettä lopputulokseen. Vastaavasti kombinaatiot, joissa tukiasemia oli lukuisia eri sijainneissa, tuottivat parhaat tulokset.

Erityisesti kombinaatio 7, jossa reitin kanssa samassa huoneessa oli 50 tukiasemaa, osoittautui kaikilla analyysimenetelmillä ihanteelliseksi. Valitettavasti kyseinen kombinaatio oli vaihtoehtoista epärealistisin, sillä tukiasemia on todellisuudessa tarkoituksenmukaista sijoittaa vain muutama yhteen huoneeseen. Hyvää tulosta saattaa selittää osittain se, että tilasto, jonka perusteella bayesilainen estimointi etäisyyksille tehtiin, koostui nimenomaan lukuisista eri pisteisiin sijoitetuista tukiasemista. Jos käytetyn tilaston ja testin tukiasemakombinaatioiden keskinäinen samankaltaisuus korreloi hyvien tulosten kanssa, tulisi tilaston muodostamista kehittää siten, että se vastaisi paremmin realistisia tukiasemakombinaatioita. Kuvassa 13 on visuaalinen esitys kombinaation 7 tuloksesta analyysimenetelmää G käyttäen.

Kuvassa 14 on puolestaan visuaalinen esitys huonosti toimineesta analyysimenetelmän ja tukiasemakombinaation yhdistelmästä. Kyseisessä kombinaatiossa 1, oli reitin kanssa samassa huoneessa vain yksi tukiasema, joka lähetti signaaleja neljästä

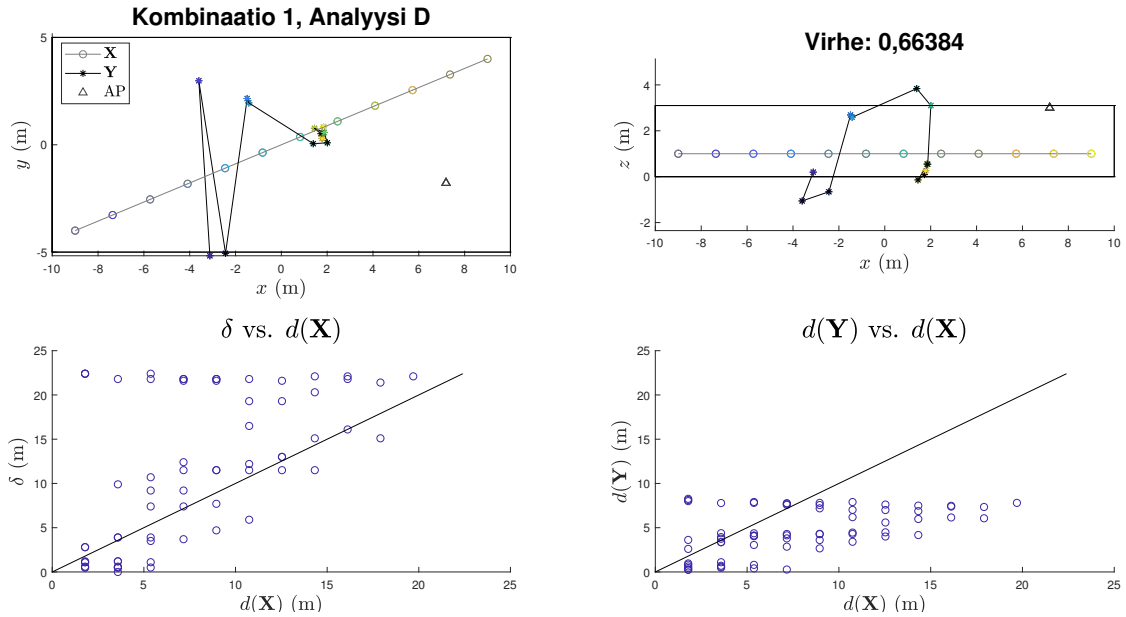


Kuva 13 Esimerkki hyvästä kombinaatio- ja analyysimenetelmän yhdistelmästä. Kombinaatiossa oli 50 tukiasemaa, joista jokaisella oli vain yksi MAC-osoite, reitin kanssa samassa huoneessa. Analyysimenetelmänä on käytetty painotettua moniulotteista skaalausta yhdessä siloitettuna bayesilaisen estimoinnin kanssa käyttäen yhteistä tilastoa. Vasen yläkulma: simuloitu ja estimoitu reitti ylhäältä kuvattuna. Oikea yläkulma: simuloitu ja estimoitu reitti sivusta katsottuna. Vasen alakulma: arvioidut etäisyydet suhteessa todellisiin etäisyyksiin. Ympyrän koko kuvaa vastaavan estimaatin painoa. Oikea alakulma: etäisyydet MDS-analyysin jälkeen suhteessa oikeisiin etäisyyksiin. Alakuvissa viiva kuvaa sitä, missä pisteet olisivat jos etäisyysestimaatti olisi optimaalinen.

eri MAC-osoitteesta. RSS-skannauksen pienen koon vuoksi etäisyysestimaatit olivat epätarkkoja.

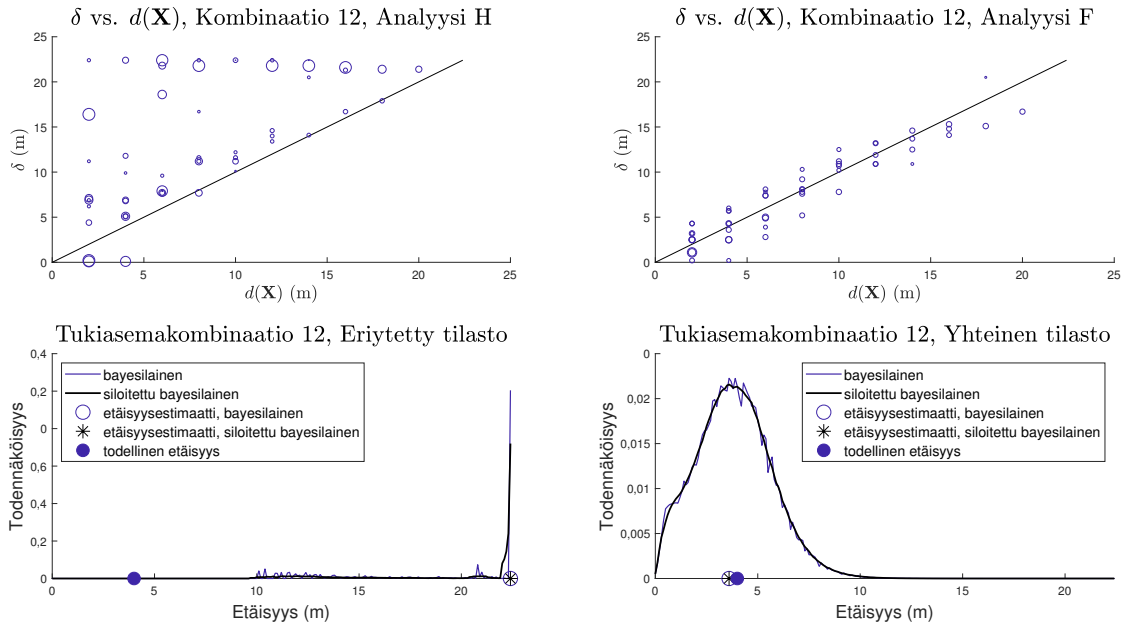
Tietyillä mittapistepareilla etäisyys estimoitui toistuvasti virheellisesti suurimmaksi mahdolliseksi. Havainto yhdistyi useimmiten pieniin tukiasemamääriin. Analyysimenetelmillä D, E, H ja I etäisyysestimoinnissa havaittiin tällaista kuvan 15 vasemman sarakkeen kaltaista ilmiötä. Kyseisille menetelmille oli yhteistä se, että bayesilaisessa etäisyyden estimoinnissa käytettiin eri tilastoja riippuen tukiaseman kategoriasta. Jos kuvan 15 vasemman alareunan kaltainen tiheysfunktio muodostui, aiheutti se huonon etäisyysestimaatin lisäksi kyseiselle estimaatille suuren painon. Virheellisesti estimoidut etäisyydet ja niihin liittyvät suuret painot aiheuttivat luonnollisesti lopputulokseen suurta virhettä.

Virheen keskiarvoja kuvasta 12 vertailemalla voidaan päätellä, että testatuista neljästätoista kombinaatiosta kuudessa bayesilaisella päättelyllä suoritettu etäisyyden estimointi oli simulaatiokokeessa parempi kuin referenssinä käytetty signaalinvaihtokäytännön laskettu euklidinen etäisyysestimaatti. Kaikki referenssianalyysin



Kuva 14 Esimerkki huonosta kombinaatio- ja analyysimenetelmän yhdistelmästä. Kombinaatiossa on vain yksi tukiasema neljällä MAC-osoitteella reitin kanssa samassa huoneessa. Analyysimenetelmänä on käytetty siloittamatonta bayesilaista estimaattia eriytetyllä tilastolla ja klassista moniulotteista skaalausta. Vasen yläkulma: simuloitu ja estimoitu reitti ylhäältä kuvattuna. Oikea yläkulma: simuloitu ja estimoitu reitti sivusta katsottuna. Vasen alakulma: arvioidut etäisyydet suhteessa todellisiin etäisyyksiin. Oikea alakulma: etäisyydet MDS-analyysin jälkeen suhteessa oikeisiin etäisyyksiin. Alakuvissa viiva kuvaa sitä, missä pisteet olisivat, jos etäisyysestimaatti olisi optimaalinen.

voittaneet menetelmät hyödynsivät kaikille tukiasemille yhteistä aineistoa. Etäisyyden tiheysfunktion siloituksella sekä käytetyllä MDS-algoritmeilla ei ollut suurta merkitystä keskimääräiseen virheeseen. Painot tosin olivat hyvin varovaisia arvioita eivätkä siten painottaneet etäisyyksiä kovinkaan rankasti. Tukiasemakombinaatioista parhaiten menestyivät kombinaatiot, joissa signaalilähteitä oli käytetty eniten.



Kuva 15 Kuvassa ylhäällä on kombinaatiolla 12 toteutunut estimoidun ja todellisen etäisyyden välinen suhde analyysimenetelmillä H ja F, jotka erosivat toisistaan tilaston käytöllä. Ympyrän koko kuvaa etäisyysestimaatin painoa. Kuvassa ala-vasemmalla on erään huonosti estimoidun etäisyyden tiheysfunktio. Vastaava tiheysfunktio käyttäen kaikille tukiasemille yhteistä tilastoa on kuvassa ala-oikealla.

5. YHTEENVETO

Tässä työssä tutkittiin moniulotteisen skaalauksen algoritmeja ja niiden soveltumista WLAN-signaalinvoimakkuusskannausten suhteellisten sijaintien etsimiseen. Tutkimuksessa esiteltiin sekä klassinen, että iteratiivinen lähestymistapa moniulotteiseen skaalaukseen. Moniulotteisen skaalauksen onnistumisen kannalta pisteiden välisten erilaisuuksien tai etäisyyksien estimointi on tärkeässä roolissa. Työssä esitettiin bayesilaiseen päättelyyn pohjautuva etäisyydenestimointimenetelmä, jonka avulla pisteiden väliset erilaisuudet arvioitiin. Bayesilaisen päättelyn pohjana oli simuloitu mittausaineisto, jonka muodostamiseksi virtuaaliseen huoneeseen ja sen lähiympäristöön simuloitiin satoja WLAN-tukiasemia.

Tutkimuskysymys oli seuraava: Jos annetaan joukko WLAN-signaalinvoimakkuusskannauksia eikä mitään muuta informaatiota, voidaanko niille löytää koordinaatitietä, joka vastaa skannauksiin liittyviä sijainteja reaali maailmassa? Ongelmaa testattiin kolmiosisella menettelytavalla, jossa ensin mittapisteiden väliset etäisyydet arvioitiin, toiseksi suoritettiin moniulotteinen skaalaus ja kolmanneksi edellisen kohdan koordinaateille suoritettiin koordinaattimuunnos, jotta skaalauksen onnistumista voitiin vertailla tunnettuihin koordinaatteihin. Testaus suoritettiin simulaatiokokeella, joka toteutettiin MATLAB-ohjelmistolla. Simulaation avulla generoidut signaalinvoimakkuusarvot perustuivat kuitenkin reaali maailmassa suoritettuihin mittauksiin.

Simulaatiossa virtuaaliseen huoneeseen muodostettiin reittejä, joille simuloitiin WLAN-signaalinvoimakkuusmittauksia neljällätoista erilaisella tukiasemakombinaatioilla. Jokaista kombinaatiota testattiin sadalla satunnaisella tukiasemien sijoittelulla. Mittaukset analysoitiin yhteensä yhdeksällä eri tavalla. Yhtä näistä analyysimenetelmistä käytettiin ulkopuolisena verrokkina, jossa ei käytetty ollenkaan bayesilaista etäisyyden estimointia. Klassisella ja painotetulla MDS-algoritmin käytöllä ei ollut suurta eroa toisiinsa nähden. Sen sijaan bayesilaisessa päättelyssä käytetty tilaston valinta vaikutti lopputulokseen merkittävästi.

Referenssianalyysin avulla mitattu virhe oli suhteellisen tasainen tukiasemakombinaatiosta riippumatta. Sen sijaan bayesilaista päättelyä käytettäessä menetelmä

onnistui selkeästi paremmin, kun tukiasemia oli enemmän ja kun ne oli sijoitettu vaihteleviin paikkoihin. Sen sijaan pienillä tukiasemamäärillä, eli signaalinvoimakkuusskannausten ollessa kooltaan pieniä, tuotti bayesilainen päättely paikoitellen jopa käyttökelvottomia etäisyysestimaatteja.

Aineistolla, jonka perusteella Baysilainen päättely tehdään, on suuri vaikutus estimaatin hyvyyteen. Todennäköisesti se on hyvin ympäristökohtainen, eikä sama aineisto siten sovellu erilaisiin huoneisiin ja tiloihin. Analyysia ei testattu tämän työn puitteissa todellisella signaalinvoimakkuusaineistolla, joten bayesilaisen etäisyysestimoinnin toimivuudesta todellisilla signaalinvoimakkuusmittauksilla ei ole taetta. Simulaatiokokeilla kuitenkin bayesilaiseen päättelyyn perustuva analyysi päihitti paikoitellen referenssianalyysin, joten lähestymistavasta saattaa olla hyötyä, mikäli menetelmää hiotaan ja testataan myös reaali maailmassa. Moniulotteinen skaalaus sekä klassisena että painotettuna versiona puolestaan on itsessään varmatoiminen kohdullisen kokoisella aineistolla. Kun algoritmille syötetyt erilaisuusestimatit ovat realistisia, tuottaa moniulotteinen skaalaus yleensä riittävän hyvän visuaalisen esityksen koordinaateista niin, että ne voidaan laittaa sijaintinsa perusteella järjestykseen.

LÄHTEET

- [1] K. Alotaibi, V. Rayward-Smith, B. de la Iglesia, Non-metric multidimensional scaling for privacy-preserving data clustering, *Intelligent Data Engineering and Automated Learning - IDEAL 2011*, Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2011, pp. 287–298.
- [2] Android Developers Guide, Wi-Fi location: ranging with RTT. Saatavissa (viitattu 9.5.2019): <https://developer.android.com/guide/topics/connectivity/wifi-rtt>
- [3] K. S. Arun, T. S. Huang, S. D. Blostein, Least-squares fitting of two 3-D point sets, *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, Vol. PAMI-9, Iss. 5, 1987, pp. 698–700.
- [4] I. Borg, P. J. F. Groenen, *Modern multidimensional scaling*, 2. ed. Springer, New York, 2005.
- [5] A. Bose, C. H. Foh, A practical path loss model for indoor WiFi positioning enhancement, 2007 6th International Conference on Information, Communications & Signal Processing, IEEE, pp. 1–5.
- [6] L. Bruno, M. Khider, P. Robertson, Online training of the path-loss model in Bayesian WLAN indoor positioning, *International Conference on Indoor Positioning and Indoor Navigation*, IEEE, 2013.
- [7] A. Buja, D. F. Swayne, M. L. Littman, N. Dean, H. Hofmann, L. Chen, Data visualization with multidimensional scaling, *Journal of Computational and Graphical Statistics*, Vol. 17, Iss. 2, 2008, pp. 444–472.
- [8] J. M. Cabero, F. De la Torre, A. Sanchez, I. Aziaga, Indoor people tracking based on dynamic weighted multidimensional scaling, *Figshare*, 2018.
- [9] F. Chan, H. C. So, Efficient weighted multidimensional scaling for wireless sensor network localization, *IEEE Transactions on Signal Processing*, Vol. 57, Iss. 11, 2009.
- [10] V. K. Chaurasiya, N. Jain, G. C. Nandi, A novel distance estimation approach for 3D localization in wireless sensor network using multi dimensional scaling, *Information Fusion*, Vol. 15, 2014.

- [11] J. Costa, N. Patwari, I. Hero Alfred, Distributed weighted-multidimensional scaling for node localization in sensor networks, *ACM Transactions on Sensor Networks (TOSN)*, Vol. 2, Iss. 1, 2006.
- [12] W. Cui, C. Wu, Y. Zhang, B. Li, W. Fu, Indoor robot localization based on multidimensional scaling, *International Journal of Distributed Sensor Networks*, 2015.
- [13] P. Davidson, R. Piche, A survey of selected indoor positioning methods for smartphones, *IEEE Communications Surveys & Tutorials*, Vol. 19, Iss. 2, 2017, pp. 1347-1370.
- [14] J. De Leeuw, Application of convex analysis to multidimensional scaling, *Recent Developments in Statistics*, pp. 133—145, 1977.
- [15] R. V. Dukupati, Probability and statistics for scientists and engineers, New Academic Science Limited, Kent, England, 2013.
- [16] D. W. Eggert, A. Lorusso, R. B. Fisher, Estimating 3-D rigid body transformations: a comparison of four major algorithms, *Machine Vision and Applications*, Vol. 9, Iss. 5, 1997, pp. 272–290.
- [17] J.E. Gentle, Matrix algebra, Second edition ed. Springer, 2017.
- [18] P. J. F. Groenen, W. J. Heiser, The tunneling method for global optimization in multidimensional scaling, *Psychometrika*, Vol. 61, Iss. 3, 1996, pp. 529–550.
- [19] A. J. Haug, Bayesian estimation and tracking, Wiley, Hoboken, NJ, 2012.
- [20] T. He, C. Huang, B. Blum, J. Stankovic, T. Abdelzaher, Range-free localization schemes for large scale sensor networks, *Proceedings of the 9th annual international conference on mobile computing and networking*, ACM, 2003, pp. 81–95.
- [21] W. Heiser, P. Groenen, Cluster differences scaling with a within-clusters loss component and a fuzzy successive approximation strategy to avoid local minima, *Psychometrika*, Vol. 62, Iss. 1, 1997, pp. 63–83.
- [22] V. Honkavirta, T. Perälä, S. Ali-Löytty, R. Piche, A comparative survey of WLAN location fingerprinting methods, *Proceedings - 6th Workshop on Positioning, Navigation and Communication, WPNC 2009*.
- [23] L. Igual, X. Perez-Sala, S. Escalera, C. Angulo, F. De la Torre, Continuous generalized procrustes analysis, *Pattern Recognition*, Vol. 47, Iss. 2, 2014, pp. 659–671.

- [24] S. J. Janke, Mathematical structures for computer graphics, Wiley, US, 2015.
- [25] X. Ji, H. Zha, Sensor positioning in wireless ad-hoc sensor networks using multidimensional scaling, IEEE INFOCOM 2004, IEEE, pp. 2661 vol.4.
- [26] D. C. Kessler, P. D. Hoff, D. B. Dunson, Marginally specified priors for non-parametric Bayesian estimation, Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Statistical Methodology), Vol. 77, Iss. 1, 2015, pp. 35–58.
- [27] M. Kristan, A. Leonardis, D. Škočaj, Multivariate online kernel density estimation with Gaussian kernels, Pattern Recognition, Vol. 44, Iss. 10, 2011, pp. 2630–2642.
- [28] J. B. Kruskal, M. Wish, Multidimensional scaling. Beverly Hills: Sage, 1978
- [29] J. B. Kruskal, Multidimensional scaling by optimizing goodness of fit to a non-metric hypothesis, Psychometrika, Vol. 29, Iss. 1, 1964, pp. 1–27.
- [30] J. B. Kruskal, Nonmetric multidimensional scaling: A numerical method, Psychometrika, Vol. 29, Iss. 2, 1964, pp. 115–129.
- [31] X. Li, RSS-Based Location Estimation with Unknown Pathloss Model, IEEE Transactions on Wireless Communications, Vol. 5, Iss. 12, 2006, pp. 3626–3633.
- [32] L. Liberti, C. Lavor, Euclidean distance geometry: an introduction, Springer, 2017.
- [33] S. M. Lynch, Introduction to applied Bayesian statistics and estimation for social scientists, 1. ed. Springer New York, Berlin, 2007.
- [34] J. R. Magnus, H. Neudecker, Matrix differential calculus with applications to simple, hadamard, and kronecker products, Journal of Mathematical Psychology, Vol. 29, Iss. 4, 1985, pp. 474–492.
- [35] S. Mazuelas, F. A. Lago, D. Gonzalez, A. Bahillo, J. Blas, P. Fernandez, R. M. Lorenzo, E. J. Abril, Dynamic estimation of optimum path loss model in a RSS positioning system, 2008 IEEE/ION Position, Location and Navigation Symposium, IEEE.
- [36] P. H. Schönemann, A generalized solution of the orthogonal procrustes problem, Psychometrika, Vol. 31, Iss. 1, 1966, pp. 1–10.
- [37] D. W. Scott, Multivariate density estimation, Wiley, US, 2015.
- [38] B. W. Silverman. Density estimation for statistics and data analysis. Chapman and Hall, New York, 1986

- [39] B. R. Stojkoska, Nodes localization in 3D wireless sensor networks based on multidimensional scaling algorithm, International Scholarly Research Notices, 2014.
- [40] D. Vo, N. Vo, S. Challa, Weighted MDS for sensor localization, in: Computational Science and Its Applications – ICCSA 2008, Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2008, pp. 409–418.
- [41] G. A. Watson, Computing Helmert transformations, Journal of Computational and Applied Mathematics, Vol. 197, Iss. 2, 2006, pp. 387–394.
- [42] X. Yan, X. G. Su, Linear regression analysis, World Scientific, Singapore, 2009.
- [43] F. Zafari, A. Gkelias, K. Leung, A survey of indoor localization systems and technologies, 2017.